

EFEITOS DE MUITOS CORPOS E PROPRIEDA
DADES DE COERÊNCIA NO PROCESSO DE
EXCITAÇÃO DE UM ÁTOMO POR IMPACTO
ELETRÔNICO.

Fernando Jorge da Paixão Filho

Orientador.- Prof. Dr. Gyorgy Csanak

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin"
para a obtenção do título de Doutor em Ciências

Agosto 1980

Aos meus amigos Malu, Julia, Tiago,
Leda, Everardo, Mariana, Stela, Wal
demar, Mônica, Eraldo, Carlos Ernes
to, Mário e Geraldo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Gyorgy Csanak pela orientação deste trabalho.

Aos Prof. Dr. V. McKoy e Dr. D.C. Carlwright pelas sugestões ao longo deste trabalho.

Aos colegas de grupo Gilda, Nely, Luis Eugênio, Emerson e Irineu pela inestimável ajuda.

Ao Dante, Lee e demais membros do CCUEC.

A Loritilde, Ana e Valdir pela datilografia.

Ao Vasco, Charles, Marta e Antonela pelos desenhos.

Ao apoio financeiro em diversas fases da Universidade Federal da Paraíba e da CAPES e do CNPq.

G L O S Á R I O

\vec{r} coordenadas espaciais

σ coordenada de spin

$r \equiv (\vec{r}, \sigma)$ coordenada de espaço e spin*

t coordenada temporal

$1 \equiv (r, t)$ coordenada de espaço, spin e tempo

$1' \equiv (r', t')$ $t_1' = t_1 + \epsilon$ ($\epsilon \rightarrow 0^+$)

$V(1-1')$ $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_1') \delta(t_1 - t_1') = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_1'|} \delta(t_1 - t_1')$

$\int dr$ significa integral em \vec{r} soma sobre os spins σ

(*) sempre que o spin for desacoplado das equações usamos r como $r = |\vec{r}|$

SUMÁRIO

No Capítulo I

A teoria de muitos corpos em primeira ordem , (FOMBT) é aplicada para calcular a seção de choque diferencial (SCD) por excitação eletrônica dos estados 4^1S e 4^3S do He a energias 40ev, 60ev e 80ev.

No Capítulo II

Baseado nas idéias da FOMBT, uma teoria é desenvolvida para excitações de átomos inicialmente em estados meta-estáveis.

No Capítulo III

A teoria de Fano-Macek para experiências de coincidência é aplicada para estados com $J=1$, nos quais a interação spin-órbita é importante, alguns efeitos novos são enfatizados, uma parametrização é introduzida e usamos a FOMBT numa forma modificada para calcular os novos parâmetros para os estados 4^1P_1 e 4^3P_1 do Ar.

No Capítulo IV

Uma teoria de muitos corpos em segunda ordem é desenvolvida e aplicada a excitação de estado 2^3S do He a 40.1ev.

ABSTRACT

In the chapter I first order many body theory (FOMBT) is applied to the calculation of differential cross section for impact excitation of the 4^1S and 4^3S states of He by electrons at energies 40ev., 60ev and 80ev.

In the chapter II we use Martin-Schwinger many body Green's function techniques to develop a theory for excitation of meta-stable targets in first order.

In the chapter the theory of Fano-Macek, for electron-photon coincidence experiments is applied to states with $J = 1$ and where the spin-orbit interaction is important, new effects are stressed and FOMBT in a modified form is used to calculate the new parameters of this theory.

In the chapter IV a second order many body is used to the excitation of 2^3S of He at 40.1 ev.

INDICE

	PÁG.
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 1	
FOMBT para Excitação dos Estados 4^1S , 4^3S do He	4
CAPÍTULO 2	
Espalhamento Inelástico de Elétrons por Átomos em Estados Metaestáveis	18
CAPÍTULO 3	
Experiência de Coincidência Elétron-Fóton em Espalhamento Inelástico de Elétrons por Átomo	31
CAPÍTULO 4	
Teoria de muitos Corpos em Segunda Ordem em Espalhamento Inelástico de Elétrons por Átomo, 2^3S He	67
REFERÊNCIAS	81
APÊNDICE A	88
APÊNDICE B	90
APÊNDICE C	92
APÊNDICE D	94
APÊNDICE E	96
APÊNDICE F	98
APÊNDICE G	100

INTRODUÇÃO

Este trabalho é dedicado ao estudo do espalhamento inelástico de elétrons por átomos, mais especificamente He e Ar, numa região de energia definida entre o limiar de ionização até aproximadamente 100 eV, chamada intermediária, como também a estudos no caso em que o fóton, subsequentemente emitido ao processo de excitação eletrônica, é detectado em coincidência retardada com o elétron espalhado inelasticamente através do uso da teoria de muitos corpos^(1-3,16). Devido a sua aplicação a problemas de astrofísica, plasma, lasers, um grande número de trabalhos tem sido dedicados a este tema. Recentemente Bransden e McDowell⁽⁸⁰⁾ num artigo de revisão sobre o assunto analisaram os modelos teóricos usados para este problema. A comparação com os resultados experimentais mostraram que dentre os modelos, um chamado teoria de muitos corpos em primeira ordem⁽⁷⁾ (FOMBT), fornecia para as excitações dos estados 2^1P e 2^1S do He⁽⁸⁾ os melhores resultados como também para os parâmetros obtidos através das experiências de coincidência⁽¹⁰⁾. Assim os bons resultados junto com a simplicidade deste modelo, nos levou a usá-lo em problemas ainda não estudados. Por outro lado, este modelo sofre de limitações exemplo: o átomo usado deve ter estado fundamental $1S$, isto nos deixa ainda muitos casos a disposição. Outra restrição é a não inclusão de efeitos relativísticos numa forma "ab initio".

AM

Recentemente a interação spin-órbita no átomo alvo foi incluída semi-empiricamente⁽⁶⁷⁾.

Esta tese então tem no seu todo dois pontos de contato um, o estudo do espalhamento de elétrons por átomos através do uso das técnicas de muitos corpos, especificamente da função de Green de muitos corpos de Martin-Schwinger. Desta forma dispensamos um capítulo de conclusão já que cada capítulo nos seus resultados é a própria conclusão. Mas existe entre eles a perspectiva que nos referimos.

Assim no capítulo I a FOMBT é usada para estudar os estados 4^1S e 4^2S do He, trabalho que buscava obter o comportamento desta teoria para estudos excitados mais altos que outras técnicas como acoplamento forte (close coupling) levaria a número muito grande de equações acopladas. No capítulo II uma teoria para espalhamento inelástico de elétrons por átomos em estados metaestáveis no mesmo espírito em que a FOMBT é usada para o estado fundamental. No Capítulo III o interesse de se estudar o Ar⁽⁶⁷⁾ e usar a FOMBT numa forma modificada para parâmetros de coincidência dos estados 4^3P_1 e 4^1P_1 . Isto nos levou, através do uso da teoria do Fano e Macek, a entender o efeito da interação spin-órbita no átomo alvo. Este entendimento nos mostrou que as experiências feitas para átomos onde este efeito era importante não poderiam ser interpretadas como no caso do He e existiam certas regras de seleção para estas experiências. Nós introduzimos nova parametrização e a FOMBT foi usada para obter valores quantitativos. Por fim no capítulo IV estudamos a excitação do 2^3S do He onde uma preliminar aplicação da teoria de muitos corpos em segunda ordem ⁽⁸¹⁾ forneceu bons resultados. Este é o primeiro cálculo em segunda ordem de muitos corpos.

Não nos referimos ao uso de técnicas de teoria dos grupos, já que isto quase se confunde com física atômica. Mas relacionado ao mesmo desenvolveremos uma técnica para desacoplar o momentum angular da amplitude de Bethe-Salpeter - entre estados excitados usando a maneira de se construir tensores no R_3 .

Isto está no apêndice A.

CAPÍTULO I

FOMBT para Excitação dos Estados $4'S, 4^3S$ do He

Para construir uma teoria quantitativa para átomos de muitos elétrons é necessário desenvolver uma aproximação para a equação de Schrödinger do sistema, seja qual for a natureza do problema com a notável exceção em algumas características do hidrogênio. Dentre os vários métodos usados para fornecer numa solução aproximada ao problema existem aqueles derivados da aplicação dos métodos da teoria de muitos corpos⁽¹⁻³⁾. Originalmente desenvolvida em física nuclear e partículas, tem desde de sua primeira aplicação por Kelly⁽⁴⁾, ao estudo da energia de correlação do estado fundamental do Be, sido aplicada em problemas de física atômica e molecular com excelentes resultados⁽⁵⁻⁶⁾. Estas aplicações tem mostrado que para obter resultados razoáveis a aproximação em ordem zero não é em absoluto num problema simples necessitando de uma solução numérica.

Estamos interessados numa aplicação ao estudo do espalhamento inelástico de elétrons por átomos dos métodos de muitos corpos em especial usando o formalismo da função de Green desenvolvido por Martin-Schwinger⁽²⁾. Derivada originalmente por Csanak e outros⁽⁷⁾ esta teoria teve como primeira aplicação o conjunto de estados como $n=2$ do He⁽⁸⁾ sendo após estendida para outros estados do He⁽⁹⁻¹⁰⁾ e Ar⁽¹¹⁾

A.M.

com bons resultados. Neste capítulo vamos deduzir a FOMBT para aplicá-la a excitação por elétrons do estado $4's$ e 4^3S do He, em primeiro lugar já que esta teoria não foi aplicada a estes estados como também é interessante se conhecer como esta teoria se mostra quando aplicada em estados mais altos. Esta dedução ⁽⁷⁾ apesar de conhecida será importante para aplicações posteriores.

Iniciamos com a dedução da matriz S usando o formalismo de Lehmann-Symanzik-Zimmerman (LSZ) ⁽¹²⁾

$$S_{nq,p} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Psi_n | a_q(t) a_p^\dagger(t) | \Psi_0 \rangle + 1$$

onde $|\Psi\rangle$ ($|\Psi_n\rangle$) $t \rightarrow -\infty$ é a função de onda do estado fundamental (excitado). Para definir a_q e a_p^\dagger suponhamos num operador de campo para o elétron $\psi(r,t)$ na representação de Heisenberg e obedecendo regras de anticomutação nos limites $t \rightarrow \infty$ ($-\infty$) definirá formas assintóticas num passado (futuro) distante. Estas formas assintóticas podem ser expandidas em uma série de ondas planas e desta expansão definiremos a_p^\dagger

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \psi(r,t) = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \psi^{\text{free}} = \sum_k a_k^{\text{in,out}} \psi_k^{\text{free}}(r,t)$$

$$\text{onde } a_k^{\text{in,out}} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} a_k(t)$$

Em termos de operadores de campo a equação 1.1 pode ser escrita

$$S_{q,p} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t' \rightarrow -\infty}} \int d^4x d^4x' \psi_q^*(x) \psi_p(x') X_n^0(x, x') \quad 1.2$$

onde

$$X_n^0(x, x') = \langle \Psi_n | T(\psi(x) \psi^*(x')) | \Psi_0 \rangle$$

é chamada amplitude de Bethe-Salpeter para buraco-partícula. Esta amplitude terá por espalhamento inelástico o mesmo papel que a função de Green de uma partícula para espalhamento elástico^(7,13,14).

Para obter uma equação para $X_n^0(1,1)$ iniciamos da equação

$$\int dz G(z) G^+(z, x') = \delta(x - x')$$

Usando a técnica da diferenciação funcional de Schwinger⁽¹⁵⁻¹⁶⁾ em relação a um potencial $U(z)$ e a definição de resposta linear generalizada⁽³⁻¹⁶⁾ na equação anterior

$$R(x, x'; z^+) = \frac{\delta G_1(x, x')}{\delta U(z)} \Big|_{U=0} = -G_2(x, x'; z) + G_1(x, z) G_1(z, x')$$

onde

$$G_2(x, x'; z) = i^2 \langle \Psi_0 | T(\psi(x) \psi(z) \psi^*(z') \psi(x')) | \Psi_0 \rangle$$

$$G_1(x, x') = i \langle \Psi_0 | T(\psi(x) \psi^*(x')) | \Psi_0 \rangle$$

T é o operador de ordenação de Wick para obter

$$R(x, x'; z^+) = G_1(x, z) G_1(z, x') + \int d^4z d^4z' d^4z'' G_1(x, z) G_1(z, z') \Xi(3, 4, 3') R(z, z'; z^+) \quad 1.3$$

para qual definiremos $\Xi(3, 4, 3') =$ chamada

função de vértice onde $\sum (3, 4)^{(3-4)}$ e auto energia da equa

ção de Dyson para G_1

$$G_1(1,1') = G_1^0(1,1') + \int dz dz' G_1^0(1,z) \Sigma(z,z') G_1(z',1')$$

e para Σ temos

$$\begin{aligned} \Sigma(1,1') &= i V(1-1') G_1(1,1') - i \delta(1-1') \int d3 V(1-3) G_1(3,3') \\ &\quad + i \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4) \frac{\delta \Sigma(4,1')}{\delta u(3)} \end{aligned}$$

Usando a operação do Gell-Mann e Low⁽¹⁷⁻¹⁸⁾ (\mathcal{L}) em $R(12,12')$ podemos obter uma equação para $X_n^0(1,1')$

$$X_n^0(1,1') = \frac{1}{dn} \mathcal{L} \int_{t_2 \rightarrow \infty} dt_2 R(1,2,1',2') X_n^0(2,2')$$

onde \mathcal{L} é definida como:

$$\mathcal{L} f(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_T^{2T} f(t) dt$$

$$dn = \int dt_2 X_0^u(2,2') X_n^0(2,2')$$

isto aplicado em (1.3) dará:

$$X_n^0(1,1') = \int d3 d3' d4 d4' G_1(1,3) G_1(3',1') \equiv (34,3'4') X_n^0(4,4') \quad 1.4$$

Uma outra equação para matriz S pode ser obtida usando (1.4)

$$S_{ng,op} = - \int d3 d3' d4 d4' f_q^{(3)} f_p^{(3')} \equiv (34,3'4') X_n^0(4,4') \quad 1.5$$

onde

$$f_q^{(G)*}(z) = i \lim_{t \rightarrow \infty} \int d\ln \psi_q^*(t) G_1(1, z)$$

$$f_p^{(G)}(z) = i \lim_{t' \rightarrow -\infty} \int d\ln' \psi_p(t') G_1(z, 1')$$

Um problema clássico que surge quando se aplica a função de Green é a cadeia infinita de equações acopladas. Isto força em algum ponto o truncamento das equações.* Em FOMBT isto é feito tomando-se $G_1(1, 1')$ na aproximação Hartree-Fock e

$$\Xi(z, z') = \frac{\delta \sum_{HF} (z, z')}{\delta u(z, z')} = [i \delta(z-z') \delta(4-3') - i \delta(z-3') \delta(4-4')] V(z-4) \quad 1.8$$

onde $\sum_{HF} (z, z') = i V(z-3') G_1^{HF}(z, 3') - i \delta(z-3') \int d5 V(z-5) G_1^{HF}(5, 5')$

Se usada em (1.4) estas condições fornecem a equação RPA para os estados excitados do sistema⁽¹⁹⁻²⁰⁾. Em (1.5) fornecem

$$S_{Vq, op} = i \int d3 d4 f_q^{(G)*}(z) f_p^{(G)}(z) V(z-4) X_u^o(4, 4') - i \int d3 d4 f_q^{(G)*}(z) f_p^{(G)}(4) V(z-4) X_u^o(z, 4) \quad 1.9$$

A dependência temporal pode ser resolvida integrando (1-9) usando-se

(*) Para uma discussão mais geral sobre o assunto ver ref. 16.

$$X_n^0(i,j) = e^{i\omega_n T_1} X_n^0(n_i, n_j; \tau) \quad T_1 = \frac{t_1 + t_1'}{2} \quad \tau = t_1 - t_1'$$

$$f_q^{(-)*}(j) = e^{i\epsilon_q t_1} f_q^{(-)*}(n_j) \gamma_{u_q}^*(\sigma_i) \quad f_p^{(+)}(j) = e^{-i\epsilon_p t_1} f_p^{(+)}(n_j) \gamma_{u_p}(\sigma_i)$$

obtendo-se

$$S_{nq,op} = -2\pi i \delta(\epsilon_q + \omega_n - \epsilon_p) \left\{ \int dn_3 dn_4 f_q^{(-)*}(n_3) f_p^{(+)}(n_4) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_n^0(n_3, n_4; 0^-) \right. \\ \left. - \int dn_3 dn_4 f_q^{(-)}(n_3) f_p^{(+)}(n_4) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_n^0(n_4, n_3; 0^-) \right\}$$

Chamamos

$$\tilde{X}_n(n_4, n_3) = X_n^0(n_3, n_4; 0^-)$$

Pode-se mostrar que a parte de spin na matriz densidade de transição $\tilde{X}_n(r', r)$ pode ser fatorada* a soma sobre os spin realizada obtendo-se

$$T_{nq,op} = (-1)^{s_1 - M_1^n} (-1)^{s_2 + u_p} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & s_1 \\ u_p & u_q & -M_1^n \end{pmatrix} [2T_D \delta_{s_1, 0} - T_E] \quad 1.10$$

onde $T_D = \int d\vec{n}_1 d\vec{n}_2 f_q^{(-)*}(\vec{n}_1) f_p^{(+)}(\vec{n}_2) V(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \tilde{X}_n(\vec{n}_1, \vec{n}_2) \quad 1.11$

$$T_E = \int d\vec{n}_1 d\vec{n}_2 f_q^{(-)*}(\vec{n}_1) f_p^{(+)}(\vec{n}_2) V(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \tilde{X}_n(\vec{n}_2, \vec{n}_1) \quad 1.12$$

A matriz T foi obtida pela expressão

$$S_{nq,op} = -2\pi i \delta(\epsilon_q + \omega_n - \epsilon_p) T_{nq,op}$$

(*) No Apêndice A o caso mais geral é desenvolvido.

Para calcular a seção de choque diferencial, usamos para os orbitais $f_k^{(\pm)}$ a expansão

$$f_k^{(\pm)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{n} \sum_{\ell m} (-i)^\ell e^{\pm i\delta_\ell(k)} P_{k\ell}(r) Y_{\ell m}(\hat{r}) Y_{\ell m}^*(\hat{k}) \quad 1.13$$

com

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin(kr - \frac{1}{2}(\ell + \delta_\ell(k))) \quad 1.14$$

Mostrou-se que⁽²¹⁾ a FOMBT pode ser vista como numa aproximação de ondas distorcidas onde o efeito de troca é incluído para o elétron na contínuo e tanto o elétron incidente como o espalhado são calculados no campo do estado fundamental. A matriz densidade de transição é calculada em RPA; para ondas distorcidas na forma usada por Madison e Shelton⁽²²⁾, usa-se Hartree-Fock. Esta última diferença para o He não é importante. Em nossa aplicação nós ainda vamos fazer uma aproximação adicional na matriz densidade de transição, tomando-a na aproximação Hartree-Fock(HF). Esta aproximação adicional foi introduzida para o estudo da excitação dos estados 2'P e 3'P dos He⁽¹⁰⁾ com ótimos resultados quando comparados com a experiência e num cálculo RPA⁽⁸⁾ também foi estendida ao Ar com excelentes resultados⁽¹¹⁾.

$$\tilde{X}_n(\vec{r}', \vec{r}) = \psi_n^*(\vec{r}') \psi_{1s}(\vec{r}) \quad 1.15$$

onde ψ_{1s} é calculado na aproximação HF e ψ_n é o estado excitado calculado na aproximação HF com o caroço ψ_{1s}

congelado*.

Com o comportamento assintótico definido a matriz T relaciona-se com a seção de choque diferencial através de

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{q}{p} |T_{nq,0p}|^2 \quad 1.16$$

Como usualmente as experiências são feitas com feixes não polarizados e o spin não é detectado devemos fazer uma média sobre o estado inicial a uma soma sobre o estado final

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{q}{p} \frac{1}{2} \sum_{m_p} \sum_{m_q} \sum_{M_s} |T_{nq,0p}|^2 \quad 1.17$$

Isto fornece para

$$S^n = 0 \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{8\pi^2} \frac{q}{p} |2T_D - T_E|^2 \quad 1.18a$$

$$S^n = 1 \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{8\pi^2} \frac{q}{p} 3 |T_E|^2$$

Usando as equações (1.13) e (1.15) em (1.11) e (1.12) obtemos as expressões

$$T_D = \frac{2\pi^2}{\sqrt{p_1}} \sum_{l_p} e^{i(\delta_{l_p}(p) + \delta_{l_p}(q))} (2l_p + 1) R^0(p, l_p, n_s; q, l_p, j_s) P_{l_p}(\cos \Theta)$$

$$T_E = \frac{2\pi^2}{\sqrt{p_1}} \sum_{l_p} e^{i(\delta_{l_p}(p) + \delta_{l_p}(q))} R^{l_p}(p, l_p, q, l_p; n_s, j_s) P_{l_p}(\cos \Theta)$$

onde

$$R^l(q, l_q, p, l_p; j_s, n_{ln}) = \int dx dy P_{l_q}(x) P_{l_p}(y) \sum_{l_{12}} \frac{1}{r_{12}} P_{l_{12}}(x) P_{n_{ln}}(y)$$

(*) Para maiores detalhes ver ref. (23), Apêndice AB-1.

Para a função ψ_0 , foi utilizada a publicada por Clemente e Roetti⁽²⁴⁾ mas fizemos testes com uma função $1s$ obtida pelo programa publicado pela C.Froese Fischer⁽²⁵⁾, bem como outra função $1s$ obtida usando uma base gaussiana por V. McKoy⁽²⁶⁾ num cálculo RPA não dando nenhuma diferença dentro da precisão de nossos cálculos. Para o estado excitado usamos a função de onda fornecida por um programa desenvolvido por G.Bates⁽²⁷⁾ adaptado ao nosso computador PDP-10 por G.D.Menezes, N.T.Padial e por mim. Este programa é usado também para obter os orbitais no contínuo*. Para calcular as integrais R^k adaptamos o programa desenvolvido por G.D.Menezes⁽²³⁾ para as nossas necessidades. Como o nosso estado excitado é ortogonal ao estado fundamental não necessitamos de correção analítica em nossas integrais diretas. A qualidade da aproximação HF para $\tilde{\chi}_n(\vec{n}, \vec{n})$, foi analisada fazendo-se o cálculo para a sessão de choque diferencial para os estados 2^1S , 2^3S , 3^1S , 3^3S , usando-se o resultado RPA⁽²⁶⁾ como também a aproximação H.F. fornecida pelo programa de G.N.Bates⁽²⁷⁾ para energia de 40ev do elétron incidente. Comparamos entre si e com os resultados publicados por Thomas e outros⁽⁸⁾, obtivemos uma concordância por dentro de um desvio de 10%.

Os nossos resultados para energia do elétron incidente de 40ev, 60ev e 80ev para 4^1S , 4^3S estão nas figuras 1 e 2 e nas tabelas 1 e 2. Na figura 1 os resul-

(*) Para uma descrição sucinta do programa ver referência 23 pg. 80.

tados teóricos para 4^1S são comparados com os resultados experimentais de Pochat e outros⁽²⁸⁾ a 60ev. A comparação dentro das limitações do modelo é razoável tendo-se em vista que para ângulos pequenos importantes efeitos de polarização não estão incluídos como mostra o estudo original de Thomas e outros⁽⁸⁾. Modelos mais complexos⁽²⁹⁾ foram aplicados por Scott e McDowell⁽³⁰⁾ para o 4^1S com resultados não substancialmente melhores que os nossos. Os resultados para 4^3S estão na figura 2, mas não existem dados experimentais para esta transição. Esta aplicação simples da FOMBT reforça resultados anteriores que⁽⁸⁻⁹⁾ para transições onde existe um termo direto tais como n^1P e n^1S , esta teoria dá bons resultados. O mesmo não acontece para estados 3^1L , onde num puro processo de troca não é suficiente para descrever este processo. Efeitos de acoplamento entre os canais de espalhamento devem ser importantes nestas transições. Estes podem ser incluídos num esquema de muitos corpos e faremos no Capítulo 4.

TABELA 1.1

SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL PARA 4¹S DO HÉLIO

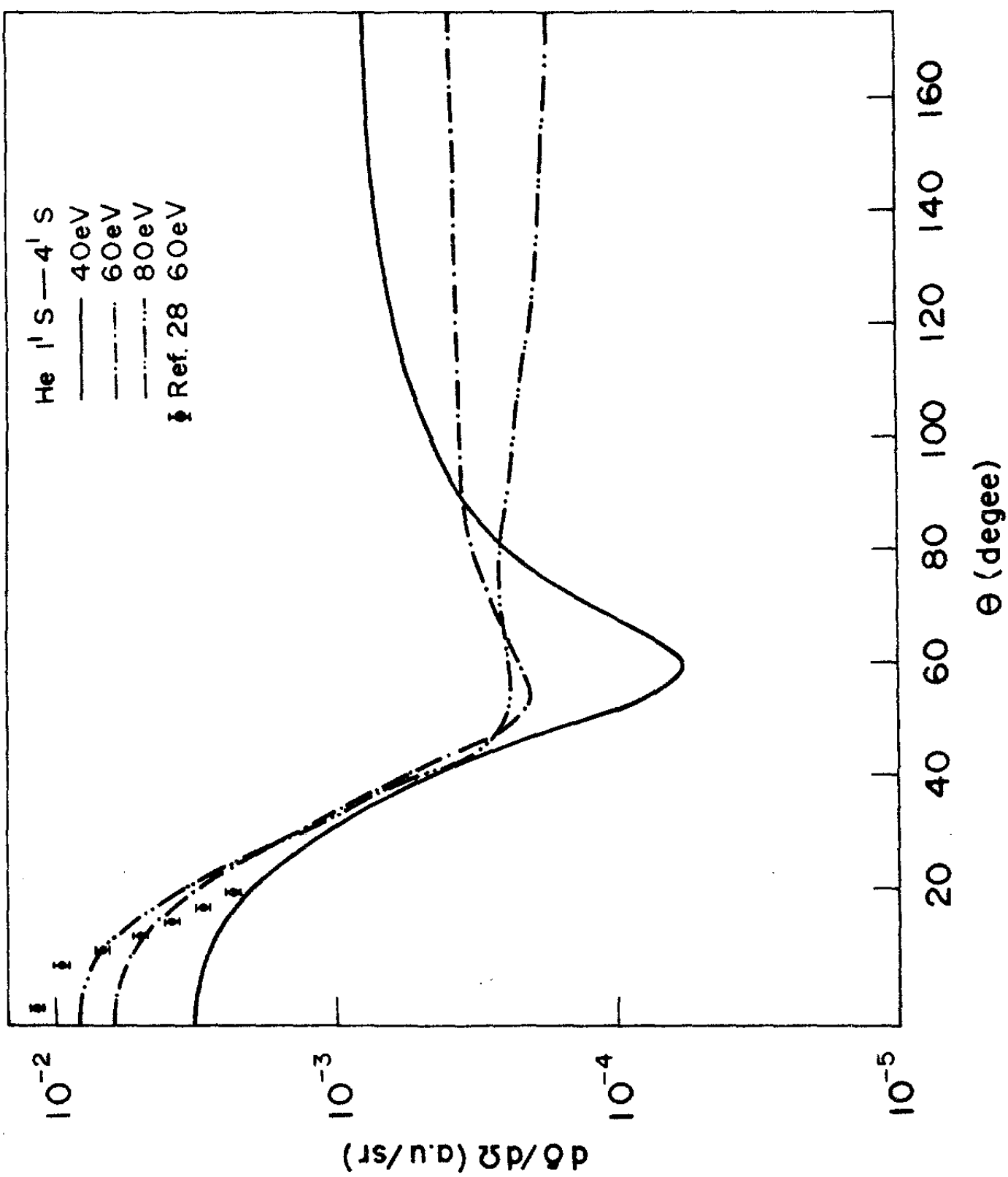
ÂNGULO	40ev	60ev	80ev
0	0.3539255E-03	0.1020736E-02	0.2536189E-03
5	0.3418015E-03	0.0983798E-03	0.2409534E-03
10	0.3086905E-03	0.9344504E-03	0.2075127E-03
15	0.2629194E-03	0.8375461E-03	0.1664395E-03
20	0.2145788E-03	0.7292881E-03	0.1313392E-03
25	0.1718400E-03	0.5957555E-03	0.1102113E-03
30	0.1389162E-03	0.4750178E-03	0.1029443E-03
35	0.1160440E-03	0.3698837E-03	0.1035151E-03
40	0.1009495E-03	0.2822873E-03	0.1047263E-03
45	0.9064976E-04	0.2145685E-03	0.1017380E-03
50	0.8270697E-04	0.1654391E-03	0.9363640E-04
55	0.7568134E-04	0.1321990E-03	0.8223509E-04
60	0.6902481E-04	0.1118190E-03	0.7020348E-04
65	0.6279403E-04	0.1016746E-03	0.5965727E-04
70	0.5743229E-04	0.9937407E-04	0.5171634E-04
75	0.5368454E-04	0.1052673E-03	0.4674911E-04
80	0.5259254E-04	0.1172714E-03	0.4478469E-04
85	0.5547882E-04	0.1356366E-03	0.4577656E-04
90	0.6383845E-04	0.1602475E-03	0.4961286E-04
95	0.7909660E-04	0.1909489E-03	0.5601142E-04
100	0.1022454E-03	0.2274569E-03	0.6443202E-04
105	0.1334552E-03	0.2693418E-03	0.7412253E-04
110	0.1717628E-03	0.3159055E-03	0.8430500E-04
115	0.2149747E-03	0.3662532E-03	0.9440496E-04
120	0.2598432E-03	0.4194208E-03	0.1041907E-03
125	0.3025141E-03	0.4741365E-03	0.1137440E-03
130	0.3391656E-03	0.5291852E-03	0.1232934E-03
135	0.3696971E-03	0.5833265E-03	0.1329341E-03
140	0.3933063E-03	0.6353789E-03	0.1425508E-03
145	0.3988057E-03	0.6812510E-03	0.1517935E-03
150	0.3845753E-03	0.7239531E-03	0.1597166E-03
155	0.3732274E-03	0.7595856E-03	0.1651008E-03
160	0.3584303E-03	0.8023325E-03	0.1704655E-03
165	0.3423038E-03	0.8424622E-03	0.1729517E-03
170	0.3250273E-03	0.8493450E-03	0.1740304E-03
175	0.3200421E-03	0.9614873E-03	0.1743276E-03
180	0.3169385E-03	0.8555713E-03	0.1713601E-03

T A B E L A 1.2

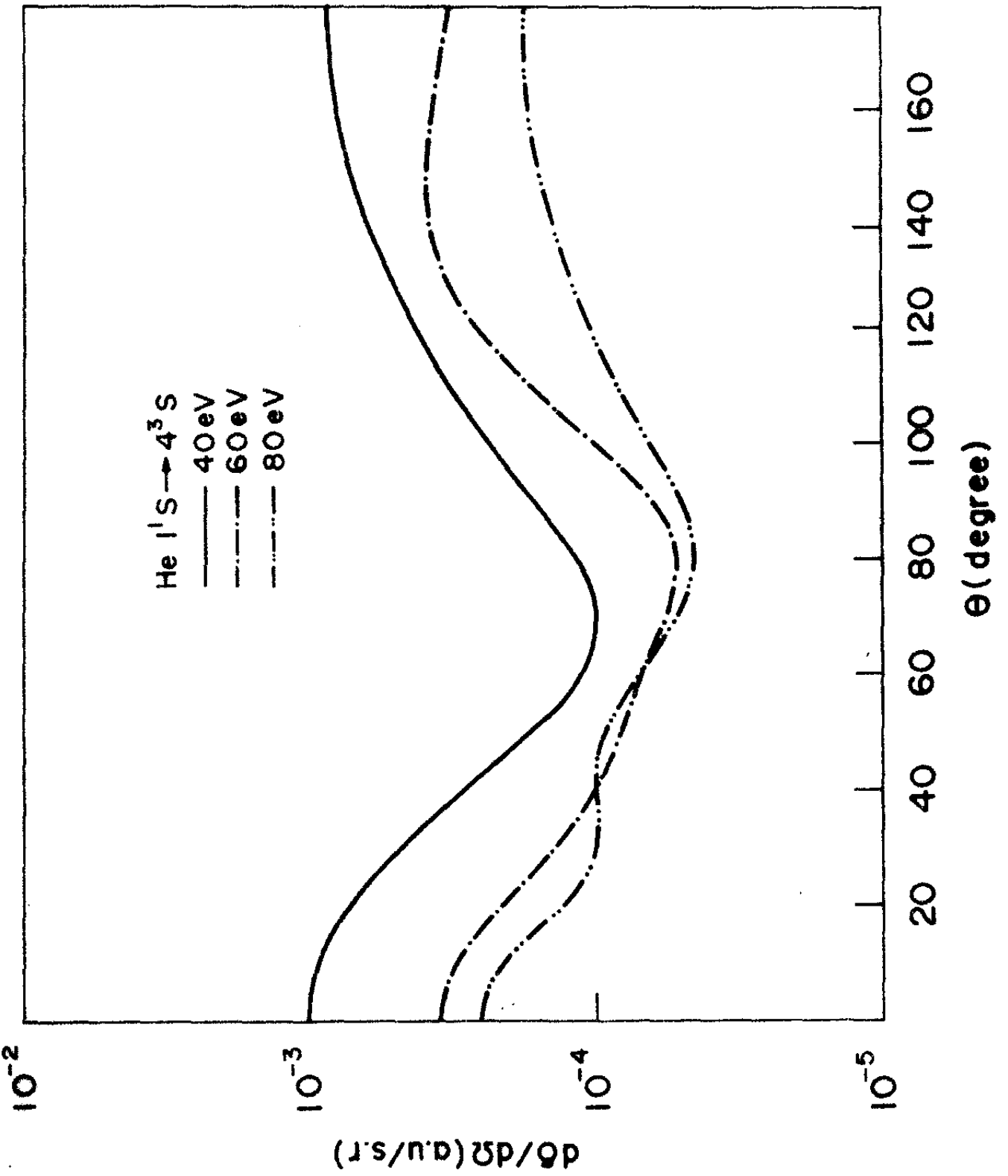
SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL PARA 4^3S DO HÉLIO

ÂNGULO	60ev	40ev	80ev
0	0.3211263E-02	0.6262262E-02	0.8254197E-02
5	0.3126969E-02	0.6021945E-02	0.7845352E-02
10	0.2980633E-02	0.5650601E-02	0.6738375E-02
15	0.2510192E-02	0.4313567E-02	0.5235176E-02
20	0.2064730E-02	0.3333527E-02	0.3687097E-02
25	0.1596966E-02	0.2337949E-02	0.2358221E-02
30	0.1155159E-02	0.1519787E-02	0.1407521E-02
35	0.7751382E-03	0.9256762E-03	0.8014106E-03
40	0.4768639E-03	0.5430207E-03	0.4684817E-03
45	0.2554120E-03	0.3302386E-03	0.3123590E-03
50	0.1343012E-03	0.2349411E-03	0.2531313E-03
55	0.7993481E-04	0.2079862E-03	0.2303996E-03
60	0.5424402E-04	0.2102848E-03	0.2430951E-03
65	0.7783237E-04	0.2436805E-03	0.2506880E-03
70	0.1219643E-03	0.2723695E-03	0.2563812E-03
75	0.1769599E-03	0.2965593E-03	0.2581321E-03
80	0.2367754E-03	0.3199360E-03	0.2558903E-03
85	0.2956484E-03	0.3359381E-03	0.2596416E-03
90	0.3529564E-03	0.3472343E-03	0.2436967E-03
95	0.4062431E-03	0.3546606E-03	0.2361578E-03
100	0.4548311E-03	0.3593727E-03	0.2286455E-03
105	0.4987661E-03	0.3623477E-03	0.2213813E-03
110	0.5381065E-03	0.3642966E-03	0.2144159E-03
115	0.5732887E-03	0.3658535E-03	0.2078442E-03
120	0.6047493E-03	0.3666530E-03	0.2018604E-03
125	0.6329148E-03	0.3674341E-03	0.1966657E-03
130	0.6581377E-03	0.3681167E-03	0.1923378E-03
135	0.6806720E-03	0.3688169E-03	0.1887791E-03
140	0.7006721E-03	0.3696233E-03	0.1857802E-03
145	0.7182127E-03	0.3705617E-03	0.1831512E-03
150	0.7333201E-03	0.3715778E-03	0.1808255E-03
155	0.7460643E-03	0.3725647E-03	0.1788795E-03
160	0.7562827E-03	0.3734687E-03	0.1774043E-03
165	0.7641919E-03	0.3743365E-03	0.1764826E-03
170	0.7697308E-03	0.3744359E-03	0.1760341E-03
175	0.7731060E-03	0.3746132E-03	0.1758859E-03
180	0.7742101E-03	0.3747953E-03	0.1756611E-03

F I G U R E 1.1



F I G U R A 1.2



CAPÍTULO II

Espalhamento Inelástico de Elétrons por Átomos em Estados Metaestáveis

] A.M

O estudo dos processos de colisão envolvendo átomos inicialmente num estado excitado é muito importante para o estudo de fenômenos em física de plasmas, lasers de excimeros, descargas em gases onde excitação a partir do estado excitado é um dos canais mais importantes entre os processos envolvidos. Do ponto de vista teórico, tem sido feitos muito poucos cálculos de excitação de átomos em estados metaestáveis por elétrons.

] A.M

Existem apenas os cálculos de Marriot (31) usando acoplamento forte para dois estados, aproximação de Born (32-34), aproximação eikonal de muitos canais (34 - 35), a aproximação Vainshtein - Presnyakov - Sobelman (33) e a aproximação de Glauber (36 - 37), na maior parte dedicados ao He e a obtenção da seção de choque, poucos estudam a distribuição angular (34 - 37). Do lado experimental, apenas três trabalhos publicados, dois dedicados a seção de choque total (38 - 39) e um terceiro com resultados preliminares para He seção de choque das excitações do tipo $(2^3S + n^3L)$ (40). Comparada com as teorias usadas em estudos de excitação a partir do estudo fundamental a FOMBT, tem fornecido resultados superiores, pelo menos para estados em que o processo direto existe. Sendo assim é nosso objetivo neste capítulo desenvolver uma teoria para espalhamento de elétrons por átomos inicialmente em estados metaestáveis dentro da FOMBT. Es

] A.M

ta teoria é original e sua total implementação numérica está em progresso⁽⁴⁹⁾.

Nós iniciamos pela matriz S do processo es
crita como:

$$S_{nq,mp} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t' \rightarrow -\infty}} \langle \Psi_n | a_q(t) a_p^\dagger(t') | \Psi_m \rangle$$

Usando os operadores de campo podemos obter

$$S_{nq,mp} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t' \rightarrow -\infty}} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_q^*(\mathbf{r}) \psi_p(\mathbf{r}') X_n^m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad 2.1$$

onde

$$X_n^m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \Psi_n | T(\psi(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}')) | \Psi_m \rangle$$

Esta amplitude terá para o espalhamento por estudos metaestáveis o mesmo papel para a função de tem para espalhamento elástico⁽¹³⁻¹⁴⁾. Então para obter uma expressão para a matriz S na FOMBT devemos chegar numa expressão para $X_n^m(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ na aproximação RPA. Esta expressão já foi deduzida por Csanak⁽⁴¹⁾ quando resolveu a transição entre estados excitados na aproximação RPA, usando a função de Green de muitos corpos de Martin - Schwinger. Outra alternativa para calcular $X_n^m(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a técnica da equação de movimento⁽⁴²⁾ usada por Mckoy e colaboradores⁽⁴³⁾ para o cálculo de fotoionização de He nos estados 2^1S e 2^3S . Nós usaremos o primeiro método.

$$\text{Definindo } R_3(123, 1'2'3') = \frac{\delta^2 G_1(1, 1')}{\delta u(2) \delta u(3)} \Big|_{u=0} \quad 2.3$$

podemos usando a equação (1.3) obter uma equação integral para esta grandeza.

$$R(123,1'2'3') = R(13,23') G_1(2,1') + G_1(1,2) R(23,1'3') + \int d4d4'd5d5'$$

$$[R(13,43') G_1(4,1') + G_1(1,4) R(4'3,1'3')] \equiv (45,4'5') R(5'2,52')$$

$$+ \int d4d4'd5d5' G_1(1,4) G_1(4,1') \equiv (45,4'5') R(5'23,52'3') \quad 2.4$$

Aplicando a operação de GellMann-Low duas vezes, $X_n^0(2,2')$ a direita e $X_0^m(3,3')$ a esquerda obteremos uma equação para $X_n^m(1,1')$

$$X_n^m(1,1') = i^+ \int d2d2'd3d3' [X_0^m(1,2') G_1(2,1') + G_1(1,2') X_0^m(2,1')] \equiv (2'3',23) X_n^0(3,3')$$

$$+ \int d2d2'd3d3' G_1(1,2') G_1(2,1') \equiv (2'3',23) X_n^m(3,3') \quad 2.5$$

A aproximação RPA está em usar G_1 na aproximação Hartree-Fock,

X_n^0, X_0^m na RPA e $\equiv(2'3',23)$ como 1.8

Usando isto (2.5) em (2.1)

$$S_{nq,mp} = - \int d2d2'd3d3' [f_q^{m(-)*}(z') f_p^{(+)}(z) + f_q^{(+)*}(z') f_p^{m(+)}(z)] \equiv (2'3',23) X_n^0(3,3')$$

$$- \int d2d2'd3d3' f_q^{(+)*}(z') f_p^{(+)}(z) \equiv (2'3',23) X_n^m(3,3') \quad 2.6$$

onde definimos

$$f_q^{m(-)*}(z') = \lim_{t_i \rightarrow \infty} \int d\eta_1 X_0^m(1,2') \psi_q^*(1) \quad 2.7$$

$$f_p^{m(+)}(z) = \lim_{t_f \rightarrow \infty} \int d\eta_1 X_0^m(2,1') \psi_p(1') \quad 2.8$$

O terceiro termo da equação 2.6 lembra o resultado da FOMBT para excitação a partir do estudo fundamental e a influência do estado inicial do átomo está apenas em $X_n^m(1,1')$ E interessante notar que tanto $f_p^{(+)}$ e $f_q^{(-)}$ são

calculados com o potencial do estado fundamental, nos primeiros termos mostram a influência do estado inicial mas a densidade de transição usada é a do estado fundamental para o estado final. De modo que para se obter uma interpretação física para esta expressão é preciso se ter sempre em conta que estamos fazendo teoria de perturbação em torno do estado fundamental.

A.M.

Vamos obter equações mais explícitas para $f^{m(-)}$ e $f^{m(+)}$ definidas em (2.7) e (2.8) nos quais está a influência do estado metaestável. Usando

$$X_0^m(1,2') = \int d^3x d^3x' d^4x d^4x' G(1,3') G(3,2') \equiv (3'4',34) X_0^m(4,4') \quad 2.9$$

em (2.7)

$$f_q^{m(-)*}(2') = \lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x d^3x' d^4x d^4x' G(1,3') \psi_q^*(1) G(3,2') \equiv (3'4',34) X_0^m(4,4')$$

Lembrando a equação (1.6)

$$f_q^{m(-)*}(2') = \frac{1}{i} \int d^3x d^3x' d^4x d^4x' f_q^{(-)*}(3') G(3,2') \equiv (3'4',34) X_0^m(4,4') \quad 2.10$$

Usando (2.9), (1.7) em (2.8) obteremos

$$f_p^{m(+)}(2) = \frac{1}{i} \int d^3x d^3x' d^4x d^4x' G(2,3') f_p^{(+)}(3) \equiv (3'4',34) X_0^m(4,4') \quad 2.11$$

podemos agora obter a dependência temporal de spin e espacial

de $f_p^{m(+)}$ e $f_q^{m(-)}$, usando

$$\equiv (3'4',34) = [-i \delta(3-3') \delta(4-4') + i \delta(3-4) \delta(3'-4')] V(3-4)$$

$$X_0^m(1,1') = e^{-i\omega_m T_1} X_0^m(n_1, n_1'; z_1)$$

$$G_1(1,1') = G_2(n_1, n_1'; z)$$

$$f_q^{(-)*}(z') = e^{i\epsilon_q t_3'} f_q^{(-)*}(n_3')$$

$$f_p^{(+)}(z) = e^{-i\epsilon_p t_3} f_p^{(+)}(n_3)$$

em 2.10 e 2.11

$$f_q^{m(-)*}(z) = e^{i(\epsilon_q - \omega_m) t_2'} \int dn_3 dn_3' dn_4 dn_4' f_q^{(-)*}(n_3') G(n_3, n_3'; \epsilon_q - \omega_m) W(n_3 n_4'; n_3 n_4) X_m(n_4', n_4) \quad 2.12$$

onde $G(n, n'; \omega)$ é transformada de Fourier de $G(n, n'; z)$

$$W(n_3' n_4', n_3 n_4) = [\delta(n_3 - n_3') \delta(n_4 - n_4') - \delta(n_3 - n_4') \delta(n_4 - n_3')] V(n_3 - n_4) \quad 2.13$$

$$X_m(n_4', n_4) = \langle 0 | \psi^\dagger(n_4') \psi(n_4) | m \rangle = -X_0^m(n_4, n_4'; 0)$$

assim

$$f_p^{m(-)*}(z') = e^{i(\epsilon_p - \omega_m) t_2'} f_q^{m(-)*}(n_2') \quad 2.14$$

onde $f_q^{m(-)*}(n_2')$ pela equação (2.12) não depende do tempo

$$f_p^{m(-)}(z) = e^{-i(\epsilon_p + \omega_m) t_2} \int dn_3 dn_3' dn_4 dn_4' G(n_2, n_3'; \epsilon_p + \omega_m) f_p^{(+)}(n_3) W(n_3 n_4'; n_3 n_4) X_m(n_4', n_4) \quad 2.15$$

da qual podemos escrever

$$f_p^{m(-)}(z) = e^{-i(\epsilon_p + \omega_m) t_2} f_p^{m(-)}(n_2)$$

que pela equação (2.15) $f_p^{m(-)}$ não depende do tempo.

Podemos também desacoplar os spins usando

$$f_p^{(+)}(n_3) = f_p^{(+)}(\vec{n}_3) \eta_{w_p}(\sigma_3)$$

$$f_q^{(-)*}(n_3') = f_q^{(-)*}(\vec{n}_3') \eta_{w_q}^*(\sigma_3')$$

$$G(n_2, n_3; \omega) = G(\vec{n}_2, \vec{n}_3; \omega) \delta_{\sigma_2, \sigma_3}$$

$$X_m(n_3, n_4) = X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \zeta_{s^m, M_s^m}(\sigma_3, \sigma_4)$$

Para $f_q^{m(-)*}$ teremos

$$f_q^{m(-)*}(n_2) = \int dn_3 dn_3' dn_4 dn_4' f_q^{(-)*}(n_3) G(n_3, n_2'; \epsilon_q - \omega_m) W(n_3 n_4'; n_3, n_4) X_m(n_4', n_4)$$

$$f_q^{m(-)*}(n_2) = \sum_{\substack{\sigma_3, \sigma_3' \\ \sigma_4, \sigma_4'}} \eta_{w_q}^*(\sigma_3) \delta_{\sigma_3, \sigma_2} \zeta_{s^m, M_s^m}(\sigma_4', \sigma_4) \delta_{\sigma_3, \sigma_3'} \delta_{\sigma_4, \sigma_4'} \int dn_3 dn_3' dn_4$$

$$dn_4' f_q^{(-)*}(\vec{n}_3') \delta(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') \delta(\vec{n}_4 - \vec{n}_4') G(\vec{n}_3, \vec{n}_2'; \epsilon_q - \omega_m) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4', \vec{n}_4)$$

$$- \sum_{\substack{\sigma_3, \sigma_3' \\ \sigma_4, \sigma_4'}} \eta_{w_q}^*(\sigma_3') \delta_{\sigma_3, \sigma_2'} \zeta_{s^m, M_s^m}(\sigma_4', \sigma_4) \delta_{\sigma_3, \sigma_4} \delta_{\sigma_3', \sigma_4'} \int dn_3 dn_3' dn_4 dn_4' f_q^{(-)*}(\vec{n}_3)$$

$$G(\vec{n}_3, \vec{n}_2'; \epsilon_q - \omega_m) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) \delta(\vec{n}_3 - \vec{n}_4') \delta(\vec{n}_3' - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4', \vec{n}_4)$$

$$f_q^{m(-)*}(n_2) = (-1)^{\frac{1}{2} + w_{s_1}} C_{-w_{s_1}, w_{s_1}}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} s^m} M_s^m \eta_{w_{s_1}}^*(\sigma_2) f_q^{m(-)*}(n_2)$$

$$f_q^{m(-)*}(n_2) = 2 f_{q,1}^{m(-)*}(n_2) \delta_{s^m, 0} - f_{q,2}^{m(-)*}(n_2)$$

onde

$$f_{q,1}^{m(-)*}(n_2) = \int dn_3 dn_4 f_q^{(-)*}(\vec{n}_3) G(\vec{n}_3, \vec{n}_2; \epsilon_q - \omega_m) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4, \vec{n}_4)$$

$$f_{q,2}^{m(-)*}(n_2) = \int dn_3 dn_4 f_q^{(-)*}(\vec{n}_4) G(\vec{n}_3, \vec{n}_2; \epsilon_q - \omega_m) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

Podemos transformar numa equação diferencial usando

$$\int d\vec{n}_2' G(\vec{n}_2', \vec{n}_2; \omega) G(\vec{n}_3, \vec{n}_2'; \omega) = \delta(\vec{n}_3 - \vec{n}_2)$$

$$G(\vec{n}, \vec{n}'; \omega) = [\omega - h(\vec{n})] \delta(\vec{n} - \vec{n}') - \sum (\vec{n}, \vec{n}'; \omega)$$

$$h(\vec{n}) = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{|\vec{r}|}$$

$$[\epsilon_q - \omega_m - h(\vec{n})] f_{q,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}) - \int d\vec{n}_2 \sum (\vec{n}, \vec{n}_2; \epsilon_q - \omega_m) f_{q,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = f_q^{(\epsilon)}(\vec{n}) \int d\vec{n}_4 V(\vec{n} - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4, \vec{n}_4)$$

$$[\epsilon_q - \omega_m - h(\vec{n})] f_{q,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}) - \int d\vec{n}_2 \sum (\vec{n}, \vec{n}_2; \epsilon_q - \omega_m) f_{q,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = \int d\vec{n}_4 f_q^{(\epsilon)}(\vec{n}_4) V(\vec{n}_4 - \vec{n}) X_m(\vec{n}, \vec{n}_4)$$

Podemos fazer um tratamento similar para $f_p^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2)$ obter a partir de

$$f_p^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' d\vec{n}_4 d\vec{n}_4' G(\vec{n}_2, \vec{n}_3'; \epsilon_p + \omega_m) f_p^{(\epsilon)}(\vec{n}_3) W(\vec{n}_3, \vec{n}_4'; \vec{n}_3, \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4', \vec{n}_4)$$

$$f_p^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = (-1)^{\frac{1}{2} + u_p} C_{-u_p, u_{s2}, M_s^m}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, S^m} \eta_{u_{s2}}(\vec{s}_2) \left[Z f_{p,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) \delta_{S^m, 0} - f_{p,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) \right]$$

onde

$$f_{p,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 G(\vec{n}_2, \vec{n}_3; \epsilon_p + \omega_m) f_p^{(\epsilon)}(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_4, \vec{n}_4)$$

$$f_{p,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 G(\vec{n}_2, \vec{n}_4; \epsilon_p + \omega_m) f_p^{(\epsilon)}(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

que podem ser transformadas para uma forma diferencial

$$[\epsilon_p + \omega_m - h(\vec{n})] f_{p,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}) - \int d\vec{n}_2 \sum (\vec{n}, \vec{n}_2; \epsilon_p + \omega_m) f_{p,1}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = f_p^{(\epsilon)}(\vec{n}) \int d\vec{n}_3 V(\vec{n} - \vec{n}_3) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_3)$$

$$[\epsilon_p + \omega_m - h(\vec{n})] f_{p,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}) - \int d\vec{n}_2 \sum (\vec{n}, \vec{n}_2; \epsilon_p + \omega_m) f_{p,2}^{m(\epsilon)}(\vec{n}_2) = \int d\vec{n}_3 f_p^{(\epsilon)}(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}) X_m(\vec{n}_3, \vec{n})$$

As equações diferenciais obedecidas por $f_p(\vec{n})$ e $f_q(\vec{n})$ são do tipo não homogêneo. A parte homogênea da equação diferencial admite uma separação entre a parte radial e a parte angular.

Vamos desenvolver o termo não homogêneo das equações

$$Q_1(\vec{n}) = f_q^{(*)}(\vec{n}) \int d\vec{n}_2 V(\vec{n} - \vec{n}_2) X_m(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$$

usando para $f_q^{(*)}(\vec{n})$ a equação (1.13)

$$V(\vec{n} - \vec{n}_2) = \sum_{l_2, m_2} \frac{4\pi}{2l_2 + 1} \frac{r_2^{l_2}}{r_2^{l_2 + 1}} Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2) Y_{l_2 m_2}^*(\vartheta_2)$$

Em geral podemos escrever^{(44)*}

$$X_m(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \sum_{l_1, l_2} X_m(l_1, l_2) Y_{l_1 m_1}^{l_1, l_2, m}(\vartheta_1, \vartheta_2)$$

onde $Y_{l_1 m_1}^{l_1, l_2, m}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2 m}^{l_1 l_2 l} Y_{l_1 m_1}(\vartheta_1) Y_{l_2 m_2}(\vartheta_2)$

onde $C_{m_1 m_2 m}^{l_1 l_2 l}$ é o coeficiente de Clebsch-Gordon⁽⁴⁵⁾

$$Q_1(\vec{n}) = \sqrt{\frac{8}{k}} \frac{\pi^{3/2}}{n} \sum_{l_1, l_1'} (i)^{l_1} e^{i\delta_{l_1}(q)} P_{q, l_1}(n) \left(\frac{[l_1][l_2]}{[l]} \right)^{1/2} \sum_{m, m'} C_{000}^{l_1 l_1' l} (1)^m C_{m, m' m}^{l_1 l_1' l} Y_{l_1 m}(\vartheta_1) Y_{l_1 m'}^*(\vartheta_1) \sum_{l_2} C_{000}^{l_1 l_2 l} \int d\vec{n}_2 \frac{r_2^{l_2}}{r_2^{l_2 + 1}} X_m(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$$

(*) O desacoplamento da parte angular pode ser obtido para este ou casos mais gerais de forma similar ao usado para a parte de spin do Apêndice A

Para $Q_2(\vec{n})$

$$Q_2(\vec{n}) = \int d\vec{n}_4 f_q^{(4)}(\vec{n}_4) V(\vec{n}-\vec{n}_4) X_m(\vec{n}, \vec{n}_4)$$

$$Q_2(\vec{n}) = \sqrt{\frac{8}{q}} \pi^{3/2} \sum_{l_1, l'_1} (-i)^{l_1} e^{i\delta l_1(q)} \sum_{m_1, m'_1} (-1)^{l_1, m_1} C_{-m_1, m'_1, m_1}^{l_1, l'_1, l_1} Y_{l'_1 m'_1}(\hat{q}) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{q})$$

$$\sum_{l_2, l_3, l_4} C_{000}^{l_1, l_4, l_2} C_{000}^{l_2, l_3, l'_1} \left\{ \begin{matrix} l_1, l'_1, l_1 \\ l_2, l_4, l_3 \end{matrix} \right\} \left(\frac{[l_1][l_3][l_4]}{[l_2]} \right)^{1/2} \int d\vec{n}_4 n_4 X_{m(l_3, l_4)}^{(n, n_4)} P_{q, l_1} \frac{r_2}{r_2^{l_2+1}}$$

Para $Q_3(\vec{n})$

$$Q_3 = f_p^{(4)}(\vec{n}) \int d\vec{n}_3 V(\vec{n}-\vec{n}_3) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_3)$$

Por similaridade com $Q_1(\vec{n})$

$$Q_3(\vec{n}) = \sqrt{\frac{8}{p}} \pi^{3/2} \sum_{l, l'} (-i)^l e^{i\delta l(p)} P_{p, l}(n) \left[\frac{[l_p][l_l]}{[l_m]} \right]^{1/2} \sum_{m_p, m'_p} (-1)^{m_p} C_{m_p, m'_p, m_p}^{l_p, l', l_p} Y_{l' m'}(\hat{p}) Y_{l m}^*(\hat{p})$$

$$\sum_{l_1, l_2} C_{000}^{l_p, l', l_p} Y_{l' m'}(\hat{p}) Y_{l m}^*(\hat{p}) \sum_{l_1, l_2} C_{000}^{l_1, l_2, l_m} \int d\vec{n}_3 n_3^2 \frac{n_2}{n_2^{l_2+1}} X_{m(l_1, l_2)}^{(n_3, n_3)}$$

Para Q_4

$$Q_4(\vec{n}) = \int d\vec{n}_3 f_p^{(4)}(\vec{n}_3) V(\vec{n}-\vec{n}_3) X_m(\vec{n}_3, \vec{n})$$

$$Q_4(\vec{n}) = \sqrt{\frac{8}{p}} \pi^{3/2} \sum_{l, l'} (-i)^l e^{i\delta l(p)} \sum_{m, m'} (-1)^{l, m} C_{-m, m', m}^{l, l', l} Y_{l' m'}(\hat{p}) Y_{l m}^*(\hat{p})$$

$$\sum_{l_1, l_3, l_4} C_{000}^{l, l_3, l_2} C_{000}^{l_2, l_4, l'_1} \left\{ \begin{matrix} l, l', l \\ l_2, l_3, l_4 \end{matrix} \right\} \left(\frac{[l_1][l_3][l_4]}{[l_2]} \right)^{1/2} \int d\vec{n}_3 n_3 X_{m(l_3, l_4)}^{(n_3, n)}$$

$$P_{p, l}(n_2) \frac{r_2}{r_2^{l_2+1}}$$

Pela expressão em ondas parciais do termo não homogêneo das equações para $f_p^{(u)}(r)$ e $f_q^{(u)*}(r)$ uma expansão que separa a parte angular da parte radial na forma

$$f_p^{(u)}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{P}} \frac{\pi^{3/2}}{n} \sum_{l, l'} (l) \begin{matrix} l \\ l' \end{matrix} e^{-i\delta_l(q)} F_{kl, l'}(r) \sum_{m, m'} (-1)^{l+m} \begin{matrix} l, l' \\ m, m' \end{matrix} Y_{l, m}(x) Y_{l', m'}^*(p)$$

$$f_q^{(u)*}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{8}{q}} \frac{\pi^{3/2}}{n} \sum_{l, l'} (l) \begin{matrix} l \\ l' \end{matrix} e^{-i\delta_l(q)} G_{kl, l'}(r) \sum_{m, m'} (-1)^{l+m} \begin{matrix} l, l' \\ m, m' \end{matrix} Y_{l, m}(x) Y_{l', m'}^*(p)$$

usando a expansão

$$\sum_{l, m} (\vec{r}, \vec{r}'; u) = \sum_{l, m} \frac{\sum_{n, n'} (nn'; u)}{nn'} Y_{l, m}(x) Y_{l', m'}^*(x')$$

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} G_{kl, l'}(r) + \left[(e_y - u_m) - \frac{Z}{n} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] G_{kl, l'}(r) = \int dr' \sum_{l', m'} (nn'; e_y - u_m) G_{kl', l'}(r')$$

$$= 2 \delta_{l, l'} P_{q, f}(n) (l) \left(\frac{P(l, l')}{[l, m]} \right)^{1/2} \sum_{l_1, l_2} \begin{matrix} l_1, l_2 \\ 0, 0 \end{matrix} \begin{matrix} l, l' \\ m, m' \end{matrix} \int dr' n^2 \frac{n^2}{n^2} X_{m, m'}^{(l_1, l_2)}(n_2, n_2)$$

$$- \sum_{l_2, l_3} \begin{matrix} l, l_2, l_3 \\ 0, 0, 0 \end{matrix} \begin{matrix} l_2, l_3, l' \\ 0, 0, 0 \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} l, l' \\ l_2, l_3 \end{matrix} \right\} \left(\frac{P(l, l_2, l_3)}{[l, l_2]} \right)^{1/2} \int dr' n^2 n X_{m, m'}^{(l_1, l_2, l_3)}(n_2, n_2) \frac{n^2}{n^2}$$

e para $F_{kl, l'}$ teremos

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} F_{klk'}^{(r)} + \left[(\epsilon_p + \omega_m) - \frac{Z}{n} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] F_{klk'}^{(r)} = \int dr_2 \sum_{n_2} (n, n_2) \epsilon_p + \omega_m$$

$$F_{klk'}^{(r)} = 2 S S_{n,0} P_{pl}(n) (-1)^l \left(\frac{[L][L']}{[L^m]} \right)^{1/2} \sum_{l_1 l_2} C_{000}^{l_1 l_2 l^m} \int dr_2 n_2^2 \frac{n_2^{l^m}}{n_2^{l^m+1}} X_{m(l_1, l_2)}^{l^m m l^m S^m}$$

$$- \sum_{l_2 l_3 l_4} C_{000}^{l_2 l_3 l_2} C_{000}^{l_2 l_4 l^m} \left\{ \begin{matrix} l^m l^m l^m \\ l_2 l_3 l_4 \end{matrix} \right\} \left(\frac{[L][L_3][L_4]}{[L_2]} \right)^{1/2} \int dr_2 n_2 n_1 X_{m(l_3, l_4)}^{l^m m l^m S^m} P_{pl}(n_2) \frac{n_2^{l_2}}{n_2^{l_2+1}}$$

Para que o nosso sistema tenha solução é necessário que a parte não homogênea vá a zero quando $r \rightarrow \infty$

$$\lim \int dr_2 n_2^2 \frac{n_2^{l^m}}{n_2^{l^m+1}} X_{m(l_1, l_2)}^{l^m m l^m S^m} = \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^{l^m+1}} \right) \int_0^\infty dr_2 n_2^{2+l^m} X_{m(l_1, l_2)}^{l^m m l^m S^m}$$

se $X_{m(\vec{n}, \vec{n})}$ para um estado ligado

$$\int_0^\infty dr_2 n_2^{2+l^m} X_{m(l_1, l_2)}^{l^m m l^m S^m} = \langle n^{l^m} \rangle_{0m}$$

onde $\langle \rangle_{0m}$ valor médio para transição entre o estado fundamental e o estado excitado m.

Uma importante característica da aproximação RPA para a matriz densidade é que devido as propriedades de ortogonalidade desta aproximação⁽⁴⁶⁾ $\langle n^{l^m} \rangle$ para $L^m = 0$ é zero. Isto é uma decorrência da ortogonalidade entre os orbitais Hartree-Fock.

Para o outro termo já que a solução no contínuo está na integral teremos de X_m um comportamento de estado ligado que fará o termo ir a zero para $r \rightarrow \infty$

Como se trata de uma equação não homogênea

as funções G_{rel} e F_{rel} não necessitam ser normalizadas já que isto está implícito na solução homogênea. As condições de contorno que G_{rel} e F_{rel} devem obedecer podem ser tiradas de argumentos físicos como os de Chang e Poe⁽⁴⁹⁾ em problema semelhante ou de maneira mais formal⁽⁴⁸⁾. Ambos fornecem que a fase destas funções será $\pi/2$ a mais que a solução homogênea deste problema regular na origem. Devemos notar que quando $\epsilon_q < \omega_m$, G_{rel} será uma função de quadrado integrável.

Da equação 2.6 para matriz S podemos obter a matriz T como

$$T_{q,op} = \int dn_2 dn'_2 dn_3 dn'_3 \left[f_q^{(\omega)^*}(n_2) f_p^{(+)}(n_2) + f_q^{(+)*}(n_2) f_p^{(\omega)}(n_2) \right] W(n'_2 n'_3, n_2 n_3) \tilde{X}_n(n'_3, n_3) \\ + \int dn_2 dn'_2 dn_3 dn'_3 f_q^{(+)*}(n_2) f_p^{(+)}(n_2) W(n'_2 n'_3, n_2 n_3) X_n^m(n'_3, n_3)$$

Usando 2.13 teremos para

$$T_{q,op} = \int dn_2 dn_3 \left[f_q^{(\omega)^*}(n_2) f_p^{(+)}(n_2) + f_q^{(+)*}(n_2) f_p^{(\omega)}(n_2) \right] V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) \tilde{X}_n(n_3, n_3) \\ - \int dn_2 dn_3 \left[f_q^{(\omega)^*}(n_3) f_p^{(+)}(n_2) + f_q^{(+)*}(n_3) f_p^{(\omega)}(n_2) \right] V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) \tilde{X}_n(n_2, n_3) \\ + \int dn_2 dn_3 f_q^{(+)*}(n_2) f_p^{(+)}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) X_n^m(n_3, n_3) \\ - \int dn_2 dn_3 f_q^{(+)*}(n_3) f_p^{(+)}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) X_n^m(n_2, n_3)$$

O segundo e quarto termo são os processos de troca correspondentes aos primeiro e terceiro termos, assim discutiremos apenas estes. O terceiro termo é semelhante ao termo direto, no caso do espalhamento inelástico a partir do estado funda-

mental e o elétron incidente e espalhado é calculado no campo fundamental. Quando usa-se o potencial do estado inicial, exemplo, $f_{ip}^{(m)}$, a matriz densidade é a do estado fundamental ao final. É fundamental entender esta expressão como uma expansão perturbativa. No primeiro termo ainda temos que quando o elétron incidente é calculado no campo de estado inicial (m) o espalhado é calculado no do fundamental e vice-versa. Isto mostra a invariância da teoria frente uma inversão temporal.

Nos podemos calcular os dois últimos termos, sem haver necessidade de mais recursos computacionais que na primeira ordem. Porém um cálculo completo presentemente está sendo desenvolvido⁽⁴⁹⁾.

Da experiência que se possui da FOMBT em espalhamento inelástico esperamos que para transições onde exista um termo direto, esta teoria forneça bons valores para seção de choque diferencial.

CAPÍTULO 3

Experiências de coincidência elétron-fóton em espalhamento inelástico de elétrons por átomos.

Ao lado das experiências clássicas de excitação de um átomo por impacto eletrônico, a área de colisões tem tido um renovado interesse despertado pelo uso nos últimos anos das técnicas de coincidência (50-64). Estas tem sido utilizadas para obter informações mais detalhadas das amplitudes que descrevem o processo de espalhamento. De uma maneira geral medidas de coincidência e a respectiva teoria tiveram uma grande ênfase em física nuclear (65) onde diversos tipos de coincidência são utilizados. Dentre os diversos tipos o que nos interessa especificamente é a coincidência retardada entre o elétron espalhado inelásticamente com o fóton emitido pelo átomo excitado, excitação esta provocada pelo elétron detectado.

Em 1971 Macek e Jaecks⁽⁵¹⁾ desenvolveram uma teoria para as experiências de coincidência elétron-fóton numa forma especificamente aplicável para colisões com átomos. Este trabalho é o primeiro a enfatizar que observando-se o fóton emitido com coincidência com o elétron espalhado pode-se obter informações mais detalhadas sobre as amplitudes de espalhamento. Esta teoria foi reformulada por Fano e Macek⁽⁵³⁾ que introduziram os parâmetros de orientação e alinhamento, resultando numa formulação mais compacta e elegante desta teoria. Existem outras formulações devido a Wykes⁽⁵²⁾ e Blum e Kleinpoppen⁽⁵³⁾.

Desde a publicação da primeira curva da medida da correlação angular entre o elétron e o fóton, por Emynian, MacAdam, Slevin e Kleinpoppen⁽⁵⁴⁾ surgiram uma série de trabalhos dedicados ao tema, boa parte destes estudavam o He (2^1P , 3^1P), mas existem alguns trabalhos sobre Ne, Ar, Kr e Hg e recentemente também a molécula H_2 ⁽⁶⁶⁾. Os cálculos teóricos pelo menos no caso do He concordam razoavelmente com os resultados experimentais e entre os modelos que obtiveram sucesso esta a FOMBT⁽¹⁰⁾. A nossa motivação inicial foi estudar o Ar. Como desenvolvida originalmente por ser uma teoria que não inclui efeitos relativísticos a FOMBT não pode ser aplicada a caso do Ar mas recentemente foi proposta uma forma aproximada de se incluir a interação spin-órbita no átomo alvo e as SCD calculadas concordam, para estados momento angular eletrônico (J) igual a um, muito bem com os resultados experimentais⁽⁶⁸⁾. A interação spin-órbita não permite mais uma fatorização dos spins e levantou a questão de como interpretar uma experiência de coincidência. Para responder estas questões escolhemos usar a teoria de Fano e Macek⁽⁵³⁾ pela simplicidade e generalidade da mesma.

A primeira hipótese que se faz é sobre a multipolaridade da radiação emitida, em física atômica se supor dipolo elétrico é para efeitos práticos exata. Só por comparação em física nuclear em correlação angular gama-gama a multipolaridade é uma das questões que a experiência busca responder. Na segunda hipótese os processos de excitação e emissão são considerados independentes, mas a emissão deve ser considerada como produzida pelo sistema elétron-átomo⁽⁶⁹⁾. Sendo assim a intensidade I medida por um detector sensível

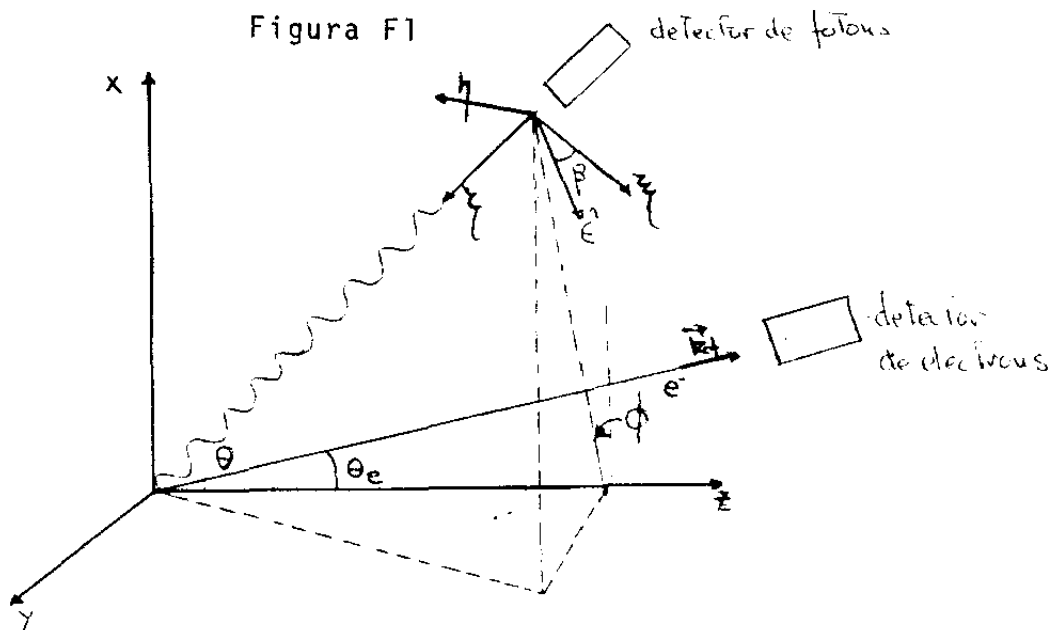
a luz com vetor polarização \vec{e} é proporcional a $\sum_{m_f} \langle \psi_f | \vec{e} \cdot \vec{P} | \psi_i \rangle^2$, onde \vec{r} é operador de transição dipolar do átomo, \sum_{m_f} indica soma sobre os valores do número quântico magnético final e $\langle \dots \rangle$ indica média sobre o estado inicial. É bom lembrar que o "estado inicial" é produzido pela colisão e o final é o que o sistema atinge após a emissão do fóton. Por outro lado a média sobre o estado inicial é efetuada usando-se como peso as amplitudes de espalhamento. A.M.

$$I = C \sum_{m_f} \langle \psi_f | \vec{e} \cdot \vec{P} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \vec{e}^* \cdot \vec{P} | \psi_f \rangle \quad 3.1$$

$$C = \frac{e^2 \omega_{fi}^4}{2\pi c^3 R^2} \quad 3.2$$

onde ω_{fi} é frequência da luz emitida, R é a distância do detector à fonte. O vetor $\vec{e} = (\cos\beta, i \sin\beta, 0)$ está definido um sistema de referência fixo no detector conforme a figura F1. Para $\beta=0$ representa detecção de luz com polarização linear e $\beta=\pi/4$ de luz circularmente polarizada para direita.

Figura F1



Temos ainda que $\vec{e} \cdot \vec{r}$ está definido no sistema de referência fixo no detector, as amplitudes de espalhamento definidas no sistema de colisão^{*}. Para então calcular as médias é necessário definir tudo num mesmo sistema de referência, porém é mais simples definir a polarização no detector e as amplitudes de espalhamento e os "estados" no sistema de colisão. Isto será usado e antes que usemos as propriedades de transformação destas grandezas, a dependência com a polarização será fatorada do valor médio. Para executar isto a equação (3-1) será rearranjada usando os seguintes fatos

i) $\sum_{m_f} |f\rangle \langle f| = P_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ onde P_f é um operador que se transforma como um escalar para rotações

ii) Pode-se reacoplar os produtos escalares $\vec{e} \cdot \vec{r}$, $\vec{e}^* \cdot \vec{r}$ obtendo-se tensores que são dependentes das componentes de \vec{e} ou de \vec{r} .

O produto escalar entre dois vetores pode ser visto da mesma forma com que se constroem tensores⁽⁷⁰⁻⁷¹⁾, fazendo-se a multipolaridade do tensor zero.

$$\vec{e} \cdot \vec{r} = \sum_{q=-1}^1 (-1)^q \epsilon_q r_q$$

onde $\epsilon_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\epsilon_x + i\epsilon_y)$ $\epsilon_0 = \epsilon_z$ $\epsilon_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\epsilon_x - i\epsilon_y)$

e de forma similar para as componentes de $\vec{r} = (\xi, \eta, \zeta)$

(*) Uma formulação deste problema usando a técnica da matriz densidade é desenvolvida nas referências 63 e 64.

$$\hat{e}_i \cdot \vec{r}' \hat{e}_j^* \cdot \vec{r} = \sum_{q_1, q_2} (-1)^{q_1+q_2} \epsilon_{-q_1, q_1}^i \epsilon_{-q_2, q_2}^j \quad 3.3$$

Definindo tensores na forma

$$S_q^k = \sum_{q_1, q_2} C_{q_1, q_2, q}^{1, 1, k} r_{q_1}^1 r_{q_2}^1 \quad 3.4$$

$$E_q^k = \sum_{q_1, q_2, q} C_{q_1, q_2, q}^{1, 1, k} \epsilon_{q_1}^* \epsilon_{q_2}^*$$

Usando (3.4) e (3.5) a equação (3.3) pode ser escrita como:

$$\hat{e}_i \cdot \vec{r}' \hat{e}_j^* \cdot \vec{r} = \sum_{k, q} (-1)^{k-q} E_{-q}^k S_q^k \quad 3.6$$

Substituindo na equação (3.1)

$$I = C \sum_{k, q} (-1)^{k-q} \langle (11) S_q^k P_j(r_1, r') | 11 \rangle E_{-q}^k \quad 3.7$$

Devido a escolha de $\hat{e} = (\cos\beta, i \sin\beta, 0)$, teremos os seguintes tensores E_q^k diferentes de zero

$$E_2^2 = E_{-2}^2 = \cos 2\beta / 2 \quad E_0^2 = 1/\sqrt{2}$$

$$E_0^1 = \sin \beta / \sqrt{2} \quad E_0^0 = 1/\sqrt{3}$$

Como $P_f(r_1, r')$ é um escalar frente a rotações então o produto $S_q^k P_f(r_1, r)$ deve se transformar da mesma forma que S_q^k . Agora fazemos uso do teorema de Wigner-Eckart para apontar o fato de que

$$\frac{\langle 11 | T_q^k | 11 \rangle}{\langle 11 | S_q^k | 11 \rangle} = \frac{\langle 11 | T^k | 11 \rangle}{\langle 11 | S^k | 11 \rangle} \quad 3.8$$

onde T_q^k é um tensor construído com as componentes do momentum angular (J). A escolha do momentum angular, orbital (L) e eletrônico (J) ou total (F) é fundamental para cada caso. A particularização para J não retira a validade geral do resultado, bastando substituir o J pelo momentum angular -

mais adequado.

A equação (3.8) por si sô não simplificaria muito, jã que normalmente empregam-se os elementos de matriz reduzidos do Teorema de Wigner-Eckart como parâmetros independentes para cada k . Nesta caso particular devido a equação - (3.7) ser reacoplamento de (3.1) que depende de um parâmetro, o elemento de matriz reduzido do operador dipolo, pode-se mostrar a seguinte relação

$$\frac{\langle i' || S^k || i \rangle}{\langle i' || T^k || i \rangle} = h^{(k)}(j_i, j_f) \frac{\langle i' || S^0 || i \rangle}{\langle i' || T^0 || i \rangle} \quad 3.9$$

onde *

$$h^{(k)}(j_i, j_f) = (-1)^{j_i - j_f} \frac{\left\{ \begin{matrix} j_i & j_i & k \\ 1 & 1 & j_f \end{matrix} \right\}}{\left\{ \begin{matrix} j_i & j_i & k \\ 1 & 1 & j_i \end{matrix} \right\}} \quad 3.10$$

Ainda podemos definir

$$\frac{\langle i' || S^0 || i \rangle}{\langle i' || T^0 || i \rangle} = \frac{S}{j_i(j_i+1)} \quad 3.11$$

Usando (3.8) a (3.11) em (3.7)

$$I = \frac{1}{3} CS \left\{ 1 - \frac{1}{2} h^{(2)}(j_i, j_f) A_0^{\det} + \frac{3}{2} h^{(2)}(j_i, j_f) A_{2+}^{\det} \cos 2\beta + \frac{3}{2} h^{(1)}(j_i, j_f) O_0^{\det} \sin 2\beta \right\} \quad 3.12$$

onde foram introduzidos no sistema do detector dois parâmetros de alinhamento

$$A_0^{\det} = \langle i' | 3 J_z^2 - J^2 | i \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.13$$

$$A_{2+}^{\det} = \langle i' | J_z^2 - J_y^2 | i \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.14$$

e um parâmetro de orientação

$$O_0^{\det} = \langle i' | J_z | i \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.15$$

* usamos o símbolo $6j$ na definição do Edmonds⁽⁴⁵⁾

Como podemos ver por (3.12) S que depende da intensidade da luz emitida na transição $i \rightarrow f$ foi fatorada deixando uma expressão em três parâmetros que dependerão do estado inicial criado pela colisão. Neste ponto é importante transformar os valores médios obtidos no sistema do detector para o sistema de colisões.

$$Q_0^{\text{det}} = Q_0^{\text{col}} \sin \theta \sin \phi \quad 3.16$$

$$A_0^{\text{det}} = A_0^{\text{col}} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) + A_{1+}^{\text{col}} \frac{3}{2} \sin 2\theta \cos \phi + A_{2+}^{\text{col}} \frac{3}{2} \sin^2 \theta \cos 2\phi \quad 3.17$$

$$A_{2+}^{\text{det}} = A_0^{\text{col}} \frac{1}{2} \sin^2 \theta \cos 2\psi + A_{1+}^{\text{col}} \left\{ \sin \theta \sin \phi \sin 2\psi + \sin \theta \cos \theta \cos \phi \cos 2\psi \right\} + A_{2+}^{\text{col}} \left\{ \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta) \cos \phi \cos 2\psi - \cos \theta \sin 2\phi \sin 2\psi \right\} \quad 3.18$$

onde θ e ϕ são os ângulos polares do eixo do detector e ψ é o ângulo que identifica a orientação do polarizador linear.

$$Q_1^{\text{col}} = \langle J_y \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.19a$$

$$A_0^{\text{col}} = \langle 3J_z^2 - J^2 \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.19b$$

$$A_{1+}^{\text{col}} = \langle J_x J_z + J_z J_x \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.19c$$

$$A_{2+}^{\text{col}} = \langle J_x^2 - J_y^2 \rangle / j_i(j_i+1) \quad 3.19d$$

Estes parâmetros no sistema de colisão dependem do ângulo de detecção do elétron e a anisotropia na emissão do fóton depende apenas de fatores geométricos. Isto é explicitado nas equações 3.16 a 3.18.

A primeira aplicação desta teoria para coincidência elétron-fóton foi a de Emynian e outros⁽⁵⁴⁾ para exci

tação do He 2'P. Neste caso como a interação spin-órbita é negligenciável então usa-se L em vez de J para nas equações*

Assim

$$Q_1^{col} = -\sqrt{2} \int_m (a^*(0) a(0)) / \sigma \quad 3.20a$$

$$A_0^{col} = [|a(1)|^2 - |a(0)|^2] / \sigma \quad 3.20b$$

$$A_{1+}^{col} = \sqrt{2} \operatorname{Re} (a^*(0) a(0)) / \sigma \quad 3.20c$$

$$A_{2+}^{col} = a^*(-1) a(0) / \sigma \quad 3.20d$$

onde $a(M_L)$ é amplitude de espalhamento do subnível magnético M_L , $\sigma_M = a^*(M) a(M)$ é a SCD do subnível M_L e

$\sigma = \sigma_0 + 2\sigma_1$. Devido a simetria de reflexão no plano de espalhamento temos $a(M) = (-1)^M a(-M)$. A existência desta simetria e a independência do spin do processo levam a uma redução do número de parâmetros. Isto foi feito por Emynian e outros⁽⁵⁴⁾ introduzindo dois parâmetros chamados λ e χ definidos como:

$$\lambda = \sigma_0 / \sigma_1 \quad 3.21$$

$$e^{i\chi} = \frac{a(1) a^*(0)}{|a(1)| |a(0)|} \quad 3.22$$

λ será então a razão entre as seções de choque diferenciais do subnível $M_L = 0$ e a para os três subníveis e χ a diferença de fase entre as matrizes T que excitam o subnível $M_L = 1$ e a que excita o $M_L = 0$. Assim

(*) O ângulo azimutal para o elétron é suposto zero

$$Q_{-1}^{\omega l} = - [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \sin \chi \quad 3.23a$$

$$A_0^{\omega l} = (1-3\lambda)/2 \quad 3.23b$$

$$A_{1+}^{\omega l} = [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \chi \quad 3.23c$$

$$A_{2+}^{\omega l} = (\lambda-1)/2 \quad 3.23d$$

Aplicar esta teoria para o Ar implica em usar J para construir os tensores, já que J , M_J são bons números quânticos para os estados excitados do Ar. Isto leva para as equações 3.19

$$Q_{-1}^{\omega l} = -\sqrt{2} \operatorname{Im} \langle a(\omega) a(\omega) \rangle / \sigma \quad 3.24a$$

$$A_0^{\omega l} = [\langle a(\omega) a(\omega) \rangle - \langle a(\omega) a(\omega) \rangle] / \sigma \quad 3.24b$$

$$A_{1+}^{\omega l} = \sqrt{2} \operatorname{Re} \langle a(\omega) a(\omega) \rangle / \sigma \quad 3.24c$$

$$A_{2+}^{\omega l} = \langle a(\omega) a(\omega) \rangle / \sigma \quad 3.24d$$

onde agora

$$\langle a(m) a(m') \rangle = \frac{1}{2} \sum_{m_{s1}, m_{s2}} a_{m_{s1}, m_{s2}}^*(m) a_{m_{s1}, m_{s2}}(m').$$

M_{s1} (M_{s2}) é a componente z do spin do elétron incidente (espalhado) e $a_{m_{s1}, m_{s2}}(m)$ é a amplitude de espalhamento para spin incidente (M_{s1}) e espalhado (M_{s2}). Esta dependência no spin leva a uma simetria menor nas médias por exemplo: no caso de He 2'P, usa-se simetria $a(m) = (-i)^{M_l} a(-m)$ em

agora com a indução explícita do spin a relação de simetria a ser utilizada é

$$\langle a(m)a(m') \rangle = (-1)^{m+m'} \langle a(-m)a(-m') \rangle$$

Como consequência, o número de parâmetros independentes aumentava e introduzimos a seguinte parametrização para este caso.

$$\lambda = \sigma_0 / \sigma \quad 3.25a$$

$$\cos \Delta = |\langle a(\omega)a(\omega) \rangle| / (\sigma_0 \sigma_1)^{1/2} \quad 3.25b$$

$$\cos \bar{\chi} = \text{Re} \langle a(\omega)a(\omega) \rangle / |\langle a(\omega)a(\omega) \rangle| \quad 3.25c$$

$$\cos \epsilon = - \langle a(-1)a(1) \rangle / \sigma_1 \quad 3.25d$$

Das quais obtêm-se

$$O_{-1}^{col} = - [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \sec \chi \cos \Delta \quad 3.26a$$

$$A_0^{col} = (1-3\lambda) / 2 \quad 3.26b$$

$$A_{1+}^{col} = [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \chi \cos \Delta \quad 3.26c$$

$$A_{2+}^{col} = (\lambda-1) \cos \epsilon / 2 \quad 3.26d$$

Como primeira consequência a introdução da interação spin-órbita leva a quatro parâmetros independentes, caso a polarização circular não seja detectada então $\beta = 0$

implicando que o produto $\cos \bar{\chi} \cos \Delta$ deve ser considerado um único, definido como⁽⁶¹⁾

$$\cos \chi = \cos \bar{\chi} \cos \Delta \quad 3.27$$

Esta parametrização possui vantagens, como por exemplo no caso L.S $\cos \epsilon = \cos \Delta = 1$, o que leva a se interpretar a variação de ϵ e Δ do valor zero como um efeito da interação spin-órbita, mas não é a única. Hermann e Hertel⁽⁷²⁾ recentemente estudavam uma parametrização similar ou mesmo pode-se escolher os próprios parâmetros de Fano e Macek⁽⁵³⁻⁷³⁾ A intensidade poderá ser escrita no caso mais geral como

$$\begin{aligned} I = & \frac{1}{3} \left(1 + \frac{1}{4} (1-3\lambda)(3\cos^2\theta-1) - [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \bar{\chi} \cos \Delta \frac{3}{2} \sin 2\theta \cos \phi \right. \\ & + \frac{3}{4} (\lambda-1) \cos \epsilon \sin^2\theta \cos 2\phi - 3 \left\{ \frac{1}{4} (1-3\lambda) \sin^2\theta \cos 2\psi \right. \\ & + [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \bar{\chi} \cos \Delta (\sin \theta \sin \phi \sin 2\psi + \sin \theta \cos \theta \cos \phi \cos 2\psi) \\ & + \frac{1}{2} (\lambda-1) \cos \epsilon \left[\frac{1}{2} (1+\cos \theta) \cos 2\phi \cos 2\psi - \cos \theta \sin 2\phi \sin 2\psi \right] \cos 2\beta \\ & \left. - 3 [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \sin \bar{\chi} \cos \Delta \sin \theta \sin \phi \sin 2\beta \right\} \cos 2\beta \end{aligned} \quad 3.28$$

Após obtermos estes resultados verificamos que todas as experiências para átomos em que a interação spin-órbita é importante tais como Ar⁽⁶¹⁻⁷⁴⁾, Kr⁽⁶⁰⁾ e Hg⁽⁶²⁾ fo-

ram interpretadas da mesma forma que o 2^1P do He⁽⁷⁵⁾. Na maioria destas experiências não é detectada a luz circularmente polarizada, $\beta=0$, de modo que temos apenas três parâmetros; ϵ , χ . Mas agora χ não terá a mesma interpretação física dada para o caso LS. A interpretação como no caso LS implica $\underline{\epsilon}=0$ o que não pode se justificar a priori.

A interação spin-órbita dá origem a outro efeito interessante se o elétron é detectado no ângulo θ_e (em relação ao feixe incidente) igual a zero. O que nós queremos mostrar é que $\langle \sigma_0 \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_0 \sigma_1 \rangle = 0$ mas σ_0 e σ_1 são diferentes de zero

Para provar supomos o átomo no estado fundamental $^1S(J=0)$ negligenciamos a interação hiperfina assumindo que o spin nuclear⁽¹⁾ e sua orientação $\langle \vec{I} \rangle$ permanecem inalterados durante o processo de colisão e emissão⁽⁷⁶⁾. Num espalhamento inelástico nos ângulos $\theta_e = 0$ e π , coincidindo com o eixo Z de quantização, a componente ao momentum angular total do sistema elétron mais átomo neste eixo deve ser conservada. Inicialmente a única componente do momentum angular neste eixo é devido ao spin do elétron que nos fornece duas situações possíveis.

(i) $m_{s_1} = m_{s_2}$ implica na conservação do componente do momentum angular total do átomo ($M_F = M_I + M_J$). Como M_I não se altera, M_J também não.

(ii) $m_{s_1} \neq m_{s_2}$ implica $\Delta M_F = \pm 1$ dependendo do spin incidente ($m_{s_1} = \pm 1/2$), com $\Delta M_J = 0$ então $\Delta M_J = \pm 1$

Para um átomo no estado fundamental do tipo 1S

o caso (i) significa a excitação do $M_J=0$ e o caso (ii) do $M_J = \pm 1$ estes fatos implicam que σ_0 e σ_1 são diferentes de zero e que $\langle a(0) a(1) \rangle = \langle a(-1) a(1) \rangle$ iguais a zero. Desde que o spin nuclear não participe do processo estes resultados serão exatos, qualquer desvio destes resultados se deve ao spin nuclear. Por exemplo, no caso do Ar $I=0$, mas no caso do Hg existem alguns isótopos que possuem $I \neq 0$ e neste a orientação de $\langle J \rangle$ pode-se transferir para $\langle I \rangle$ como determinada por métodos óticos por Lehmann (77). Esses resultados implicam que os parâmetros ϵ e Δ terão valores definidos para $\theta_e = 0^\circ$ e 180° . Definindo $0 < \epsilon < \pi$ e $0 < \Delta < \pi/2$ para $\theta_e = 0^\circ$ e 180° $\epsilon = \Delta = \pi/2$. Nas experiências onde 0_{-1}^{col} não é determinado e por conseguinte temos três parâmetros, $|\chi|$ definido em 3.27 terá valor também $\pi/2$.

Esta diferença nas experiências de coincidência quando se compara as interpretações nos caso do He e do Ar, também pode ser vista se analisarmos os parâmetros de Stokes (79) da radiação emitida. Estes quatro parâmetros reais podem caracterizar completamente o estado de polarização da radiação emitida. São definidos como (64)

$$I = I(0^\circ) + I(90^\circ)$$

$$I_{y3} = I(0^\circ) - I(90^\circ)$$

3.29

$$I_{y1} = I(45^\circ) - I(135^\circ)$$

$$I_{y2} = I_{RHC} - I_{LHC}$$

onde $I(\psi)$ em intensidade de um feixe que passou por um polarizador linear com o eixo de transmissão com ângulo ψ , I_{RHC} (I_{LHC}) é a intensidade de luz circularmente polarizada para a direita (esquerda). Usando a equação (3-28) para I podemos relacionar os parâmetros de Fano-Macek com os de

Stokes usando (3-29)

$$I = CS \left\{ \frac{2}{3} + A_0 + (\cos^2\theta - \frac{1}{3}) + A_1 + \sin 2\theta \cos\phi + A_2 + \sin^2\theta \cos 2\phi \right\}$$

$$I_{y_1} = CS \left\{ 2 A_2 \cos\theta \sin 2\phi - 2 A_1 \sin\theta \sin\phi \right\}$$

$$I_{y_2} = CS 2 A_1 \sin\theta \sin\phi$$

$$I_{y_3} = -CS \left\{ A_0 \sin^2\theta + A_1 + \sin 2\theta \cos\phi + A_2 (1 + \cos^2\theta) \cos 2\phi \right\}$$

Em termos estes parâmetros definem-se outros dois

$$P = (I_{y_1}^2 + I_{y_2}^2 + I_{y_3}^2)^{1/2} / I = (y_1^2 + y_2^2 + y_3^2)^{1/2}$$

$$e \quad \mu = \frac{y_1 + i y_2}{\sqrt{1 - y_3}} = |\mu| e^{i\beta}$$

se $P=1$ significa que pode-se conseguir um polarizador que admita todo o feixe, μ é o grau de coerência complexa. Para um feixe luz completamente coerente $|P| = |\mu| = 1$.

As hipóteses usadas para interpretar as experiências de coincidência nos estados 1P do He levam a que $|P| = |\mu| = 1$ e β a fase efetiva é igual X . Isto foi confirmado por Standage e Kleinpoppen⁽⁵⁵⁾ que mediram os parâmetros de Stokes da radiação emitida na transição $3^1P \rightarrow 2^1S$, caracterizando esta emissão como completamente coerente. Is

to não será mais verdade no caso do Ar e em outros átomos em que a interação spin-órbita no átomo seja importante como Ne, Kr, Hg. Para demonstrar isto, vamos determinar os parâmetros supondo o detector de luz na posição $\theta = \phi = \pi/2$ como na experiência de Standage e Kleinpopp⁽⁵⁵⁾

$$\eta_1 = - \frac{4 [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \Delta \cos \bar{\lambda}}{[1 + \cos \epsilon + \lambda(1 - \cos \epsilon)]}$$

$$\eta_2 = - \frac{4 [\lambda(1-\lambda)]^{1/2} \cos \Delta \sin \bar{\lambda}}{[1 + \cos \epsilon + \lambda(1 - \cos \epsilon)]}$$

$$\eta_3 = \frac{(3\lambda - 1) - (1 - \lambda) \cos \epsilon}{[1 + \cos \epsilon + \lambda(1 - \cos \epsilon)]}$$

$$|\mu| = \frac{\cos \Delta}{\left(\frac{1 + \cos \epsilon}{2}\right)^{1/2}}$$

$$\beta = \pi + \bar{\lambda}$$

$$P = \left[1 + \frac{8\lambda(1-\lambda)(2\cos^2 \Delta - \cos \epsilon - 1)}{[(1+\lambda) + (1-\lambda)\cos \epsilon]^2} \right]^{1/2}$$

Por exemplo a $\theta_e = 0^\circ$ como $\cos \Delta = 0$ $|\mu| = 0$ em oposição ao caso L-S onde $\Delta = \epsilon = 0$ e $|\mu| = 1$ e P agora não é necessariamente 1.

Usando a FOMBT numa forma em que a interação spin-órbita no átomo alvo foi incluída de uma forma aproximada⁽¹¹⁻⁶⁷⁾ nós calculamos os parâmetros λ , $\bar{\lambda}$, Δ , ϵ , e χ para

os estados $4s\ [^1/2]$ e $4s'\ [^1/2]$ do Ar para energias incidentes 16,20,30,50 e 80.4 ev, cujos resultados estão nas tabelas 3.1 a 3.10 e nas figuras 3.1 a 3.10.

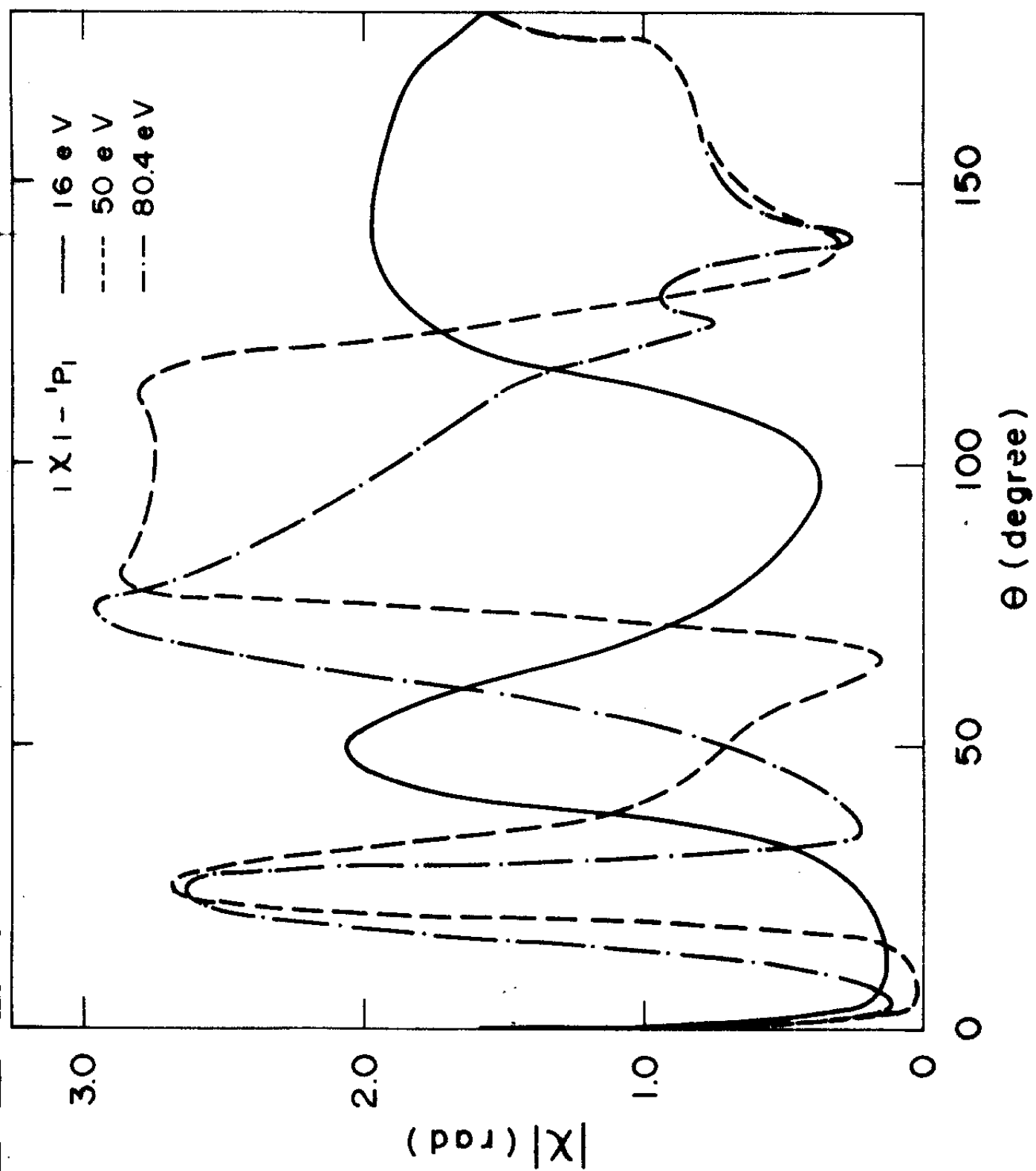
Os nossos resultados mostram que, principalmente a energias baixas o desvio dos parâmetros ϵ e Δ do valor L.S igual a zero é bastante apreciável e esperamos que isto possa servir de indicação aos experimentais para que procurem estes efeitos, já a comparação com os dois resultados experimentais é pelo menos problemática devido a interpretação incorreta mas alguma coisa pode ser dita . Existem dois ângulos em que temos resultados publicados e 50ev e $\theta_e = 5^\circ$ por Malcolm e McConkey⁽⁶¹⁾ e a $\theta_e = 10^\circ$ com energias de 50, 80 e 110 ev, por Pochat e outros⁽⁷⁴⁾, para λ e χ . Os gráficos para λ de nossos valores teóricos mostram muita semelhança com os de λ para o n'P do He onde exatamente a ângulos pequenos a concordância não é muito boa e deveremos esperar o mesmo tipo de concordância. Porém nossos resultados mostram que a medida que aumenta-se a energia do elétron incidente o primeiro mínimo da curva de λ tende para valores de ângulos mais baixos, esta tendência pode ser vista para ambos os estados e também nos valores experimentais. Vale lembrar que para estes ângulos efeitos de polarização são muito grandes e não são levados em conta nesta teoria.

} D.M

os estados $4s\ ^1P^o$ e $4s\ ^3P^o$ do Ar para energias incidentes 16,20,30,50 e 80.4 ev, cujos resultados estão nas tabelas 3.1 a 3.10 e nas figuras 3.1 a 3.10.

Os nossos resultados mostram que, principalmente a energias baixas o desvio dos parâmetros ϵ e Δ do valor L.S igual a zero é bastante apreciável e esperamos que isto possa servir de indicação aos experimentais para que procurem estes efeitos, já a comparação com os dois resultados experimentais é pelo menos problemática devido a interpretação incorreta mas alguma coisa pode ser dita . Existem dois ângu - los em que temos resultados publicados e 50ev e $\theta_e = 5^0$ por Malcolm e McConkey⁽⁶¹⁾ e a $\theta_e = 10^0$ com energias de 50, 80 e 110 ev, por Pochat e outros⁽⁷⁴⁾, para λ e χ . Os gráficos para λ de nossos valores teóricos mostram muita ' semelhança com os de λ para o n'P do He onde exatamente a ângulos pequenos a concordância não é muito boa e deveremos esperar o mesmo tipo de concordância. Porém nossos resultados mostram que a medida que aumenta-se a energia do elétron incidente o primeiro mínimo da curva de λ tende para valores de ângulos mais baixos, esta tendência pode ser vista para ambos os estados e também nos valores experimentais. Vale lembrar que para estes ângulos efeitos de polarização são muito grandes e não são levados em conta nesta teoria.

FIGURA 3.1



F I G U R A 3.2

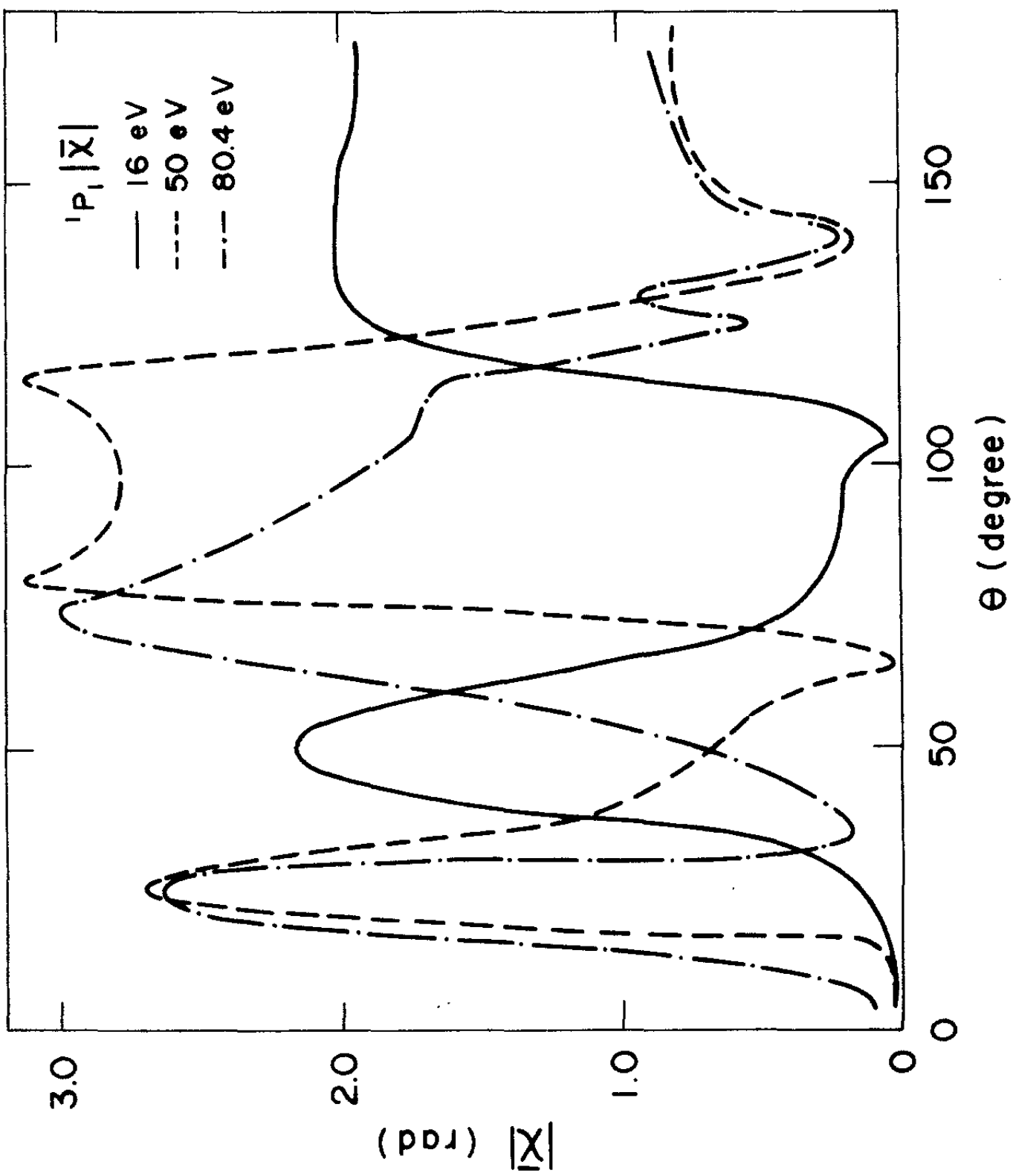
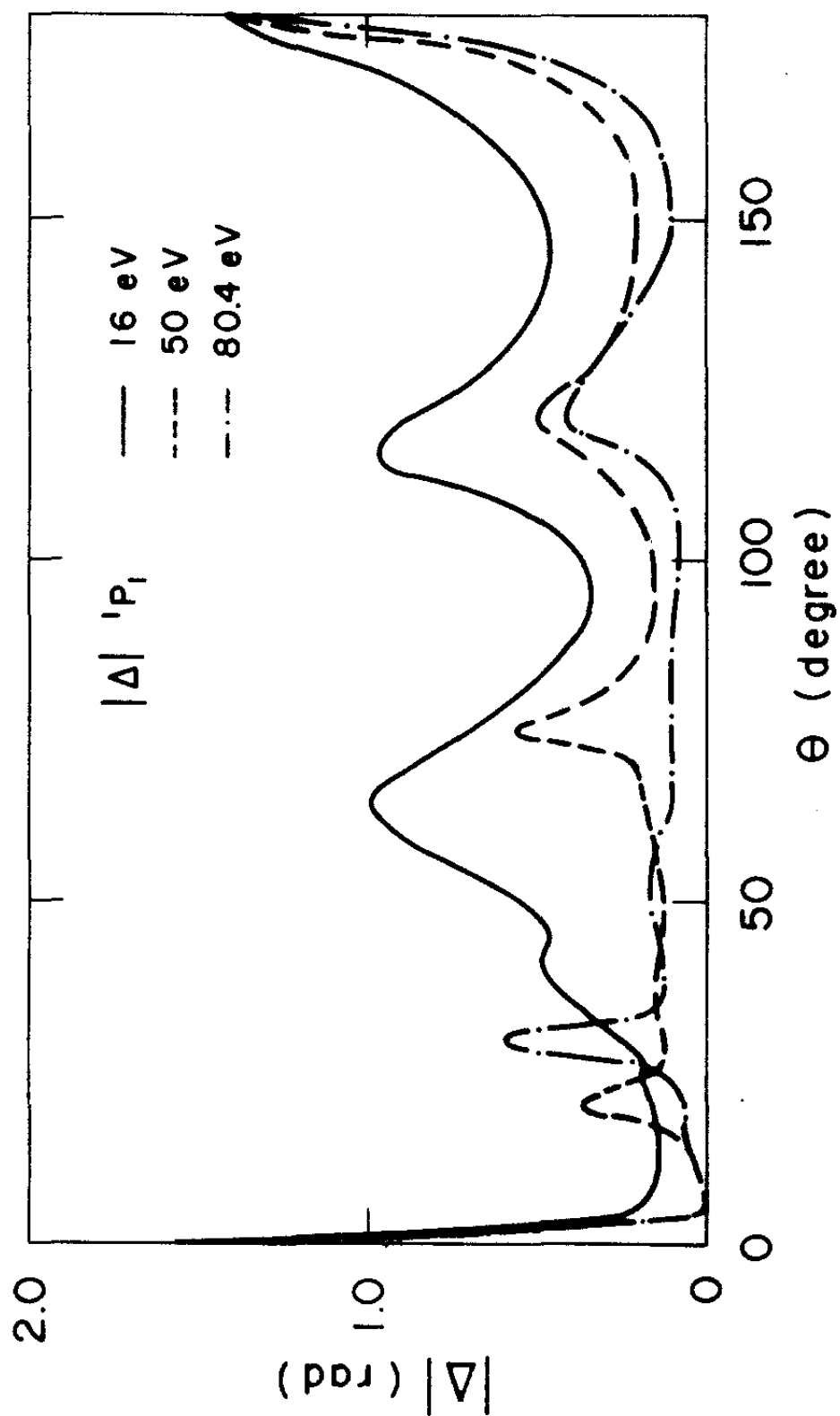


FIGURA 3.3



F I G U R A 3.4

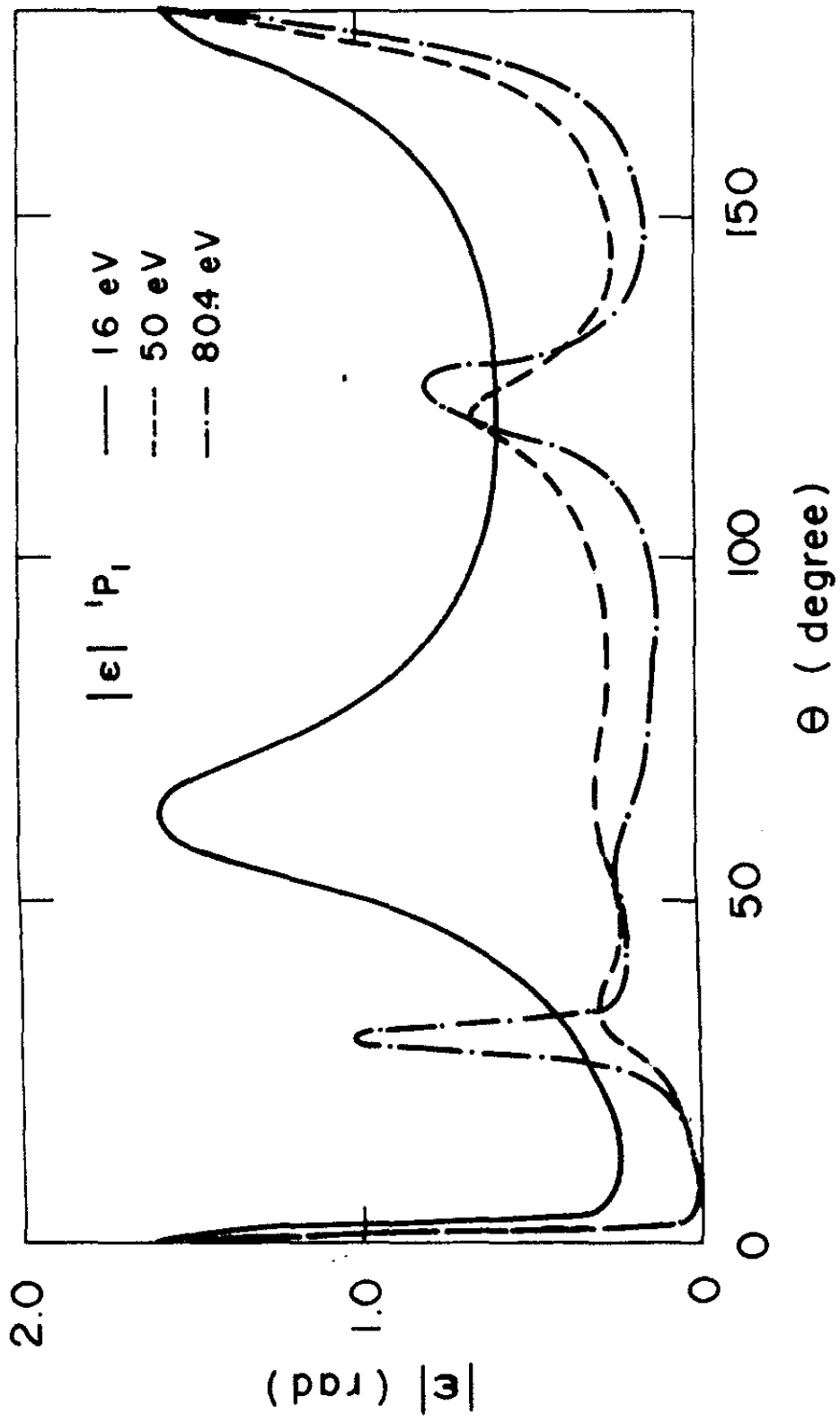
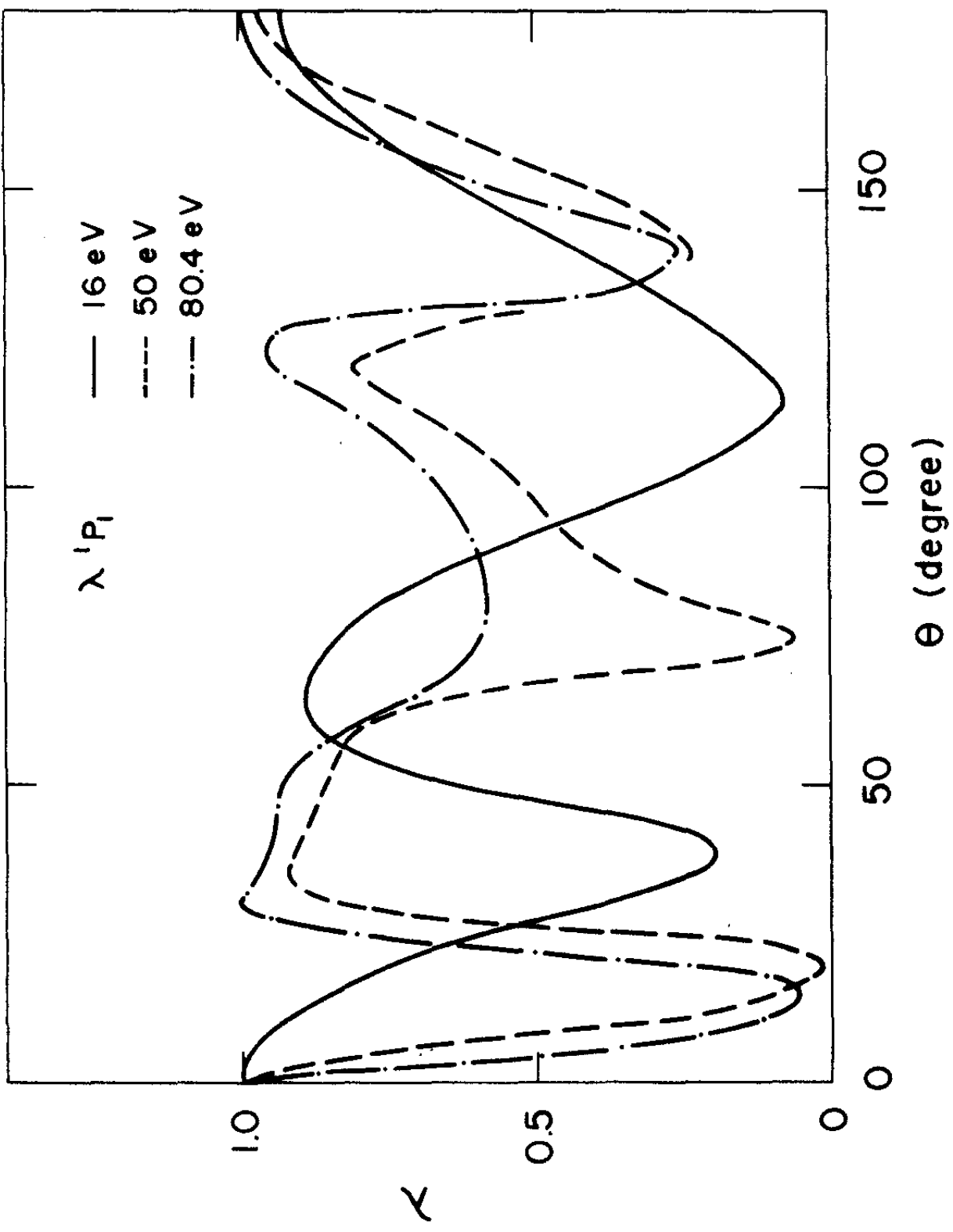


FIGURA 3.5



F I G U R A 3.6

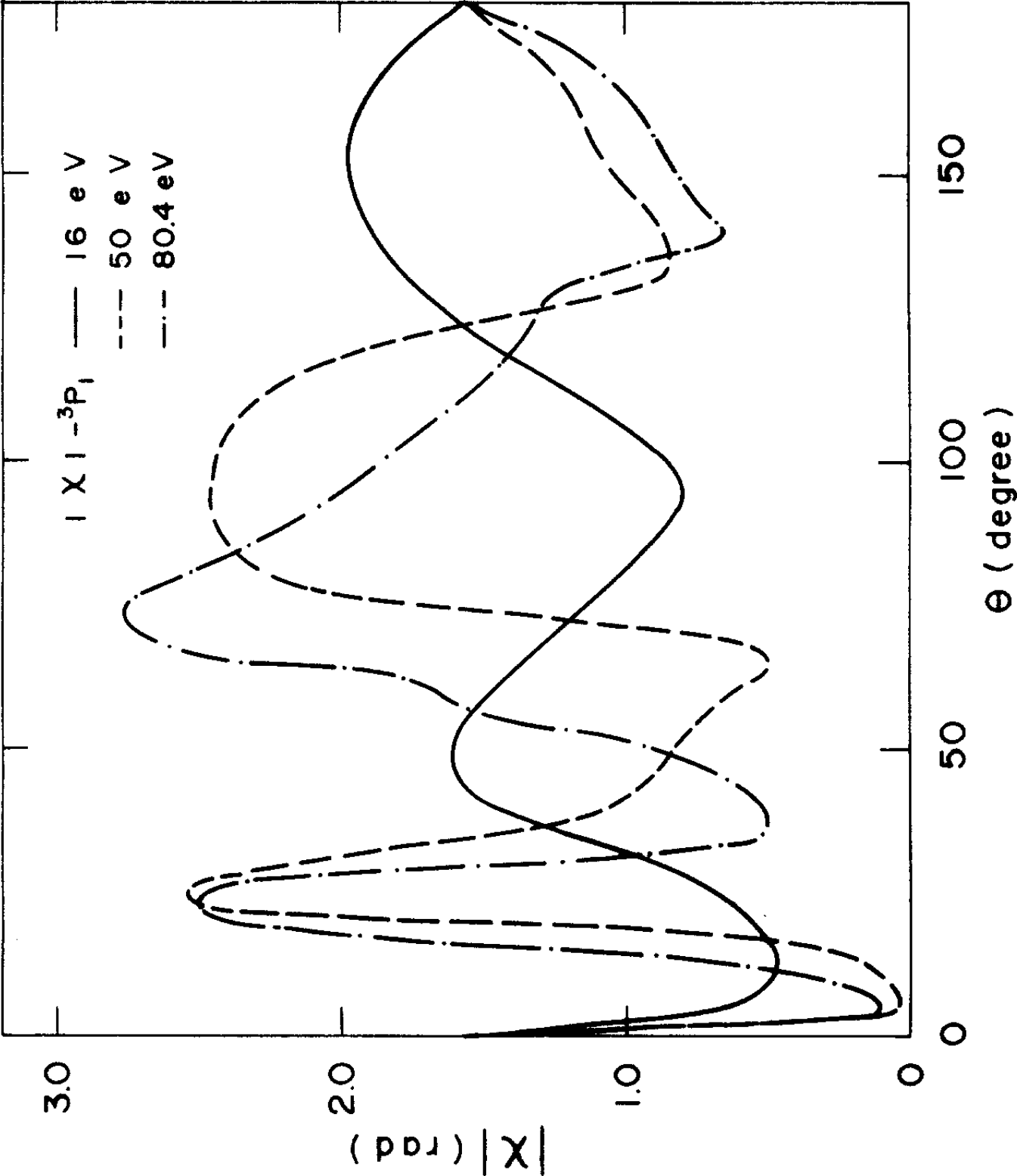
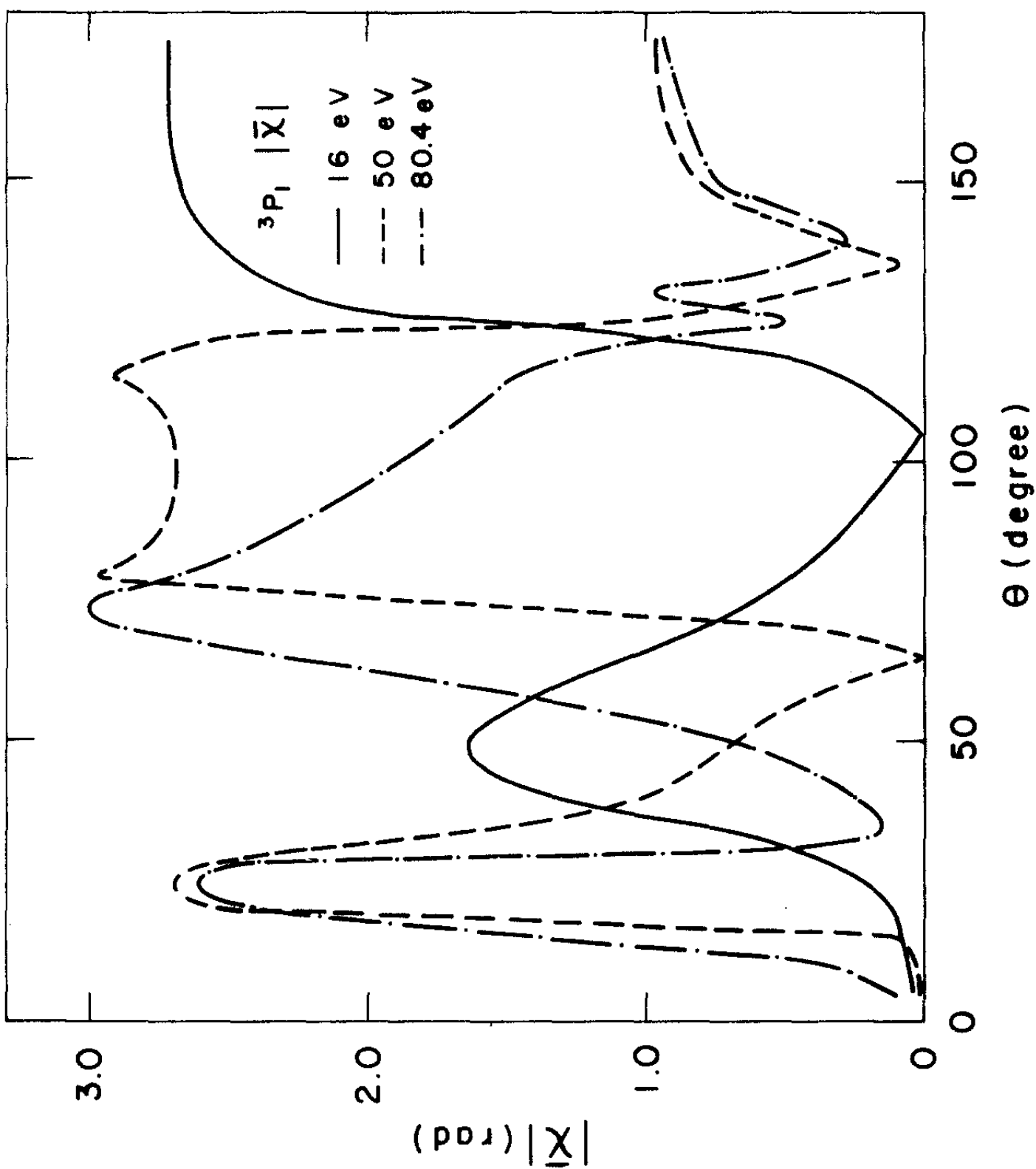
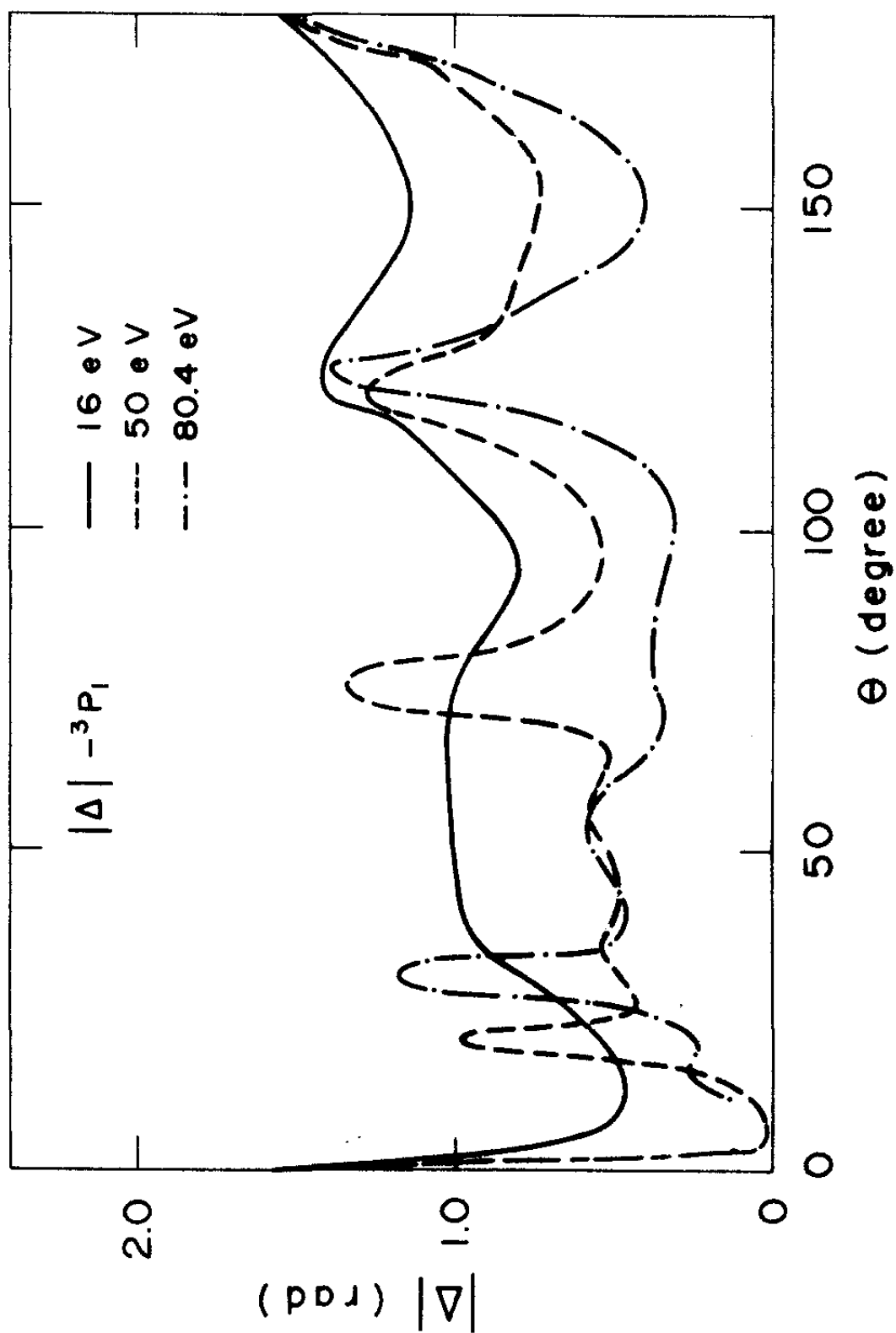
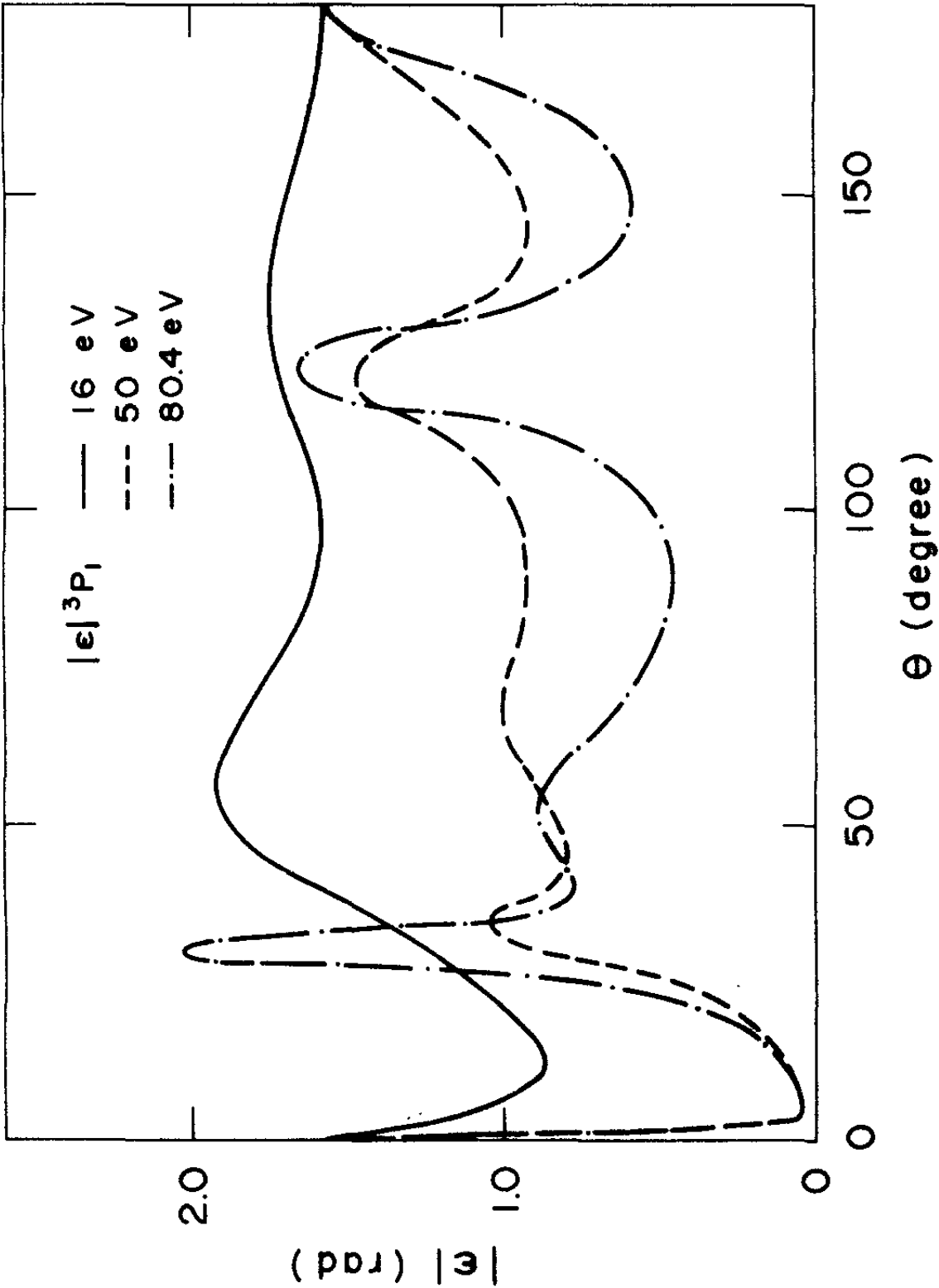


FIGURA 3.7



F I G U R A 3.8

F I G U R A 3.9



T A B E L A 3.1

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 3P1 DO ARGONIO

PARAMETRO LAMBDA

ANGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	.992	.957	.975	1.000	1.000
5	.971	.916	.838	.701	.449
10	.911	.836	.546	.328	.134
15	.813	.651	.276	.102	.056
20	.684	.481	.128	.024	.308
25	.537	.331	.171	.365	.851
30	.401	.249	.366	.813	.983
35	.319	.270	.565	.899	.958
40	.315	.370	.684	.881	.935
45	.364	.483	.733	.853	.923
50	.422	.566	.739	.825	.907
55	.465	.612	.717	.787	.869
60	.487	.629	.673	.717	.781
65	.488	.623	.615	.561	.660
70	.475	.564	.548	.298	.587
75	.450	.565	.482	.186	.561
80	.417	.519	.420	.272	.557
85	.382	.462	.364	.357	.569
90	.349	.400	.313	.408	.591
95	.323	.337	.264	.437	.620
100	.309	.285	.221	.460	.658
105	.308	.254	.190	.483	.706
110	.321	.247	.180	.512	.765
115	.341	.260	.200	.546	.829
120	.365	.283	.245	.559	.868
125	.389	.307	.300	.504	.807
130	.411	.328	.351	.389	.559
135	.428	.349	.391	.308	.270
140	.442	.355	.418	.293	.231
145	.452	.362	.436	.322	.365
150	.459	.366	.447	.378	.518
155	.463	.368	.453	.449	.653
160	.466	.368	.456	.529	.767
165	.467	.368	.458	.608	.855
170	.467	.367	.460	.676	.912
175	.467	.367	.462	.721	.941
180	.467	.367	.462	.737	.950

T A B E L A 3.2

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 3P1 DO ARGONIO

PARAMETRO GUI-BARRA

ANGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	.000	.000	.000	.000	.000
5	.037	.085	.154	.017	.102
10	.050	.093	.225	.036	.353
15	.076	.106	.398	.108	1.378
20	.128	.121	.848	2.048	2.407
25	.231	.131	1.725	2.693	2.624
30	.443	.108	2.222	2.276	.955
35	.846	.132	2.261	1.447	.160
40	1.324	1.589	1.807	1.004	.243
45	1.588	2.003	.999	.826	.415
50	1.631	1.891	.701	.703	.684
55	1.529	1.624	.679	.546	1.099
60	1.350	1.267	.777	.308	1.668
65	1.082	.891	.966	.010	2.302
70	.836	.630	1.239	.388	2.853
75	.627	.335	1.548	1.904	3.008
80	.463	.174	1.805	2.954	2.683
85	.337	.070	1.963	2.782	2.428
90	.238	.007	2.025	2.718	2.221
95	.155	.026	2.009	2.691	2.042
100	.079	.038	1.936	2.686	1.881
105	.004	.030	1.837	2.701	1.737
110	.115	.001	1.783	2.754	1.607
115	.307	.076	1.928	2.911	1.475
120	.742	.625	2.527	2.704	1.200
125	1.616	2.853	3.137	1.117	.491
130	2.225	3.006	2.900	.547	.950
135	2.469	3.074	2.816	.095	.494
140	2.581	3.100	2.784	.331	.288
145	2.640	3.128	2.772	.629	.627
150	2.675	3.132	2.770	.798	.741
155	2.696	3.110	2.772	.886	.791
160	2.709	3.096	2.776	.929	.825
165	2.717	3.084	2.780	.947	.857
170	2.721	3.075	2.783	.954	.891
175	2.724	3.069	2.785	.955	.919
180	.000	.000	.000	.000	.000

TABELA 3.3

CÁLCULO DOS PARÂMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 3P1 DO ARGÔNIO

PARÂMETRO QUI-MC

ÂNGULO	10.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	.657	.827	.447	.036	.105
10	.489	.544	.353	.078	.363
15	.485	.456	.474	.247	1.384
20	.549	.474	.952	1.831	2.376
25	.674	.621	1.667	2.536	2.485
30	.878	.944	1.886	2.173	1.346
35	1.161	1.334	1.810	1.465	.537
40	1.433	1.573	1.626	1.075	.510
45	1.581	1.651	1.428	.926	.644
50	1.603	1.637	1.274	.844	.860
55	1.551	1.582	1.197	.754	1.183
60	1.464	1.510	1.205	.623	1.655
65	1.362	1.431	1.286	.506	2.235
70	1.255	1.353	1.415	.765	2.695
75	1.145	1.256	1.560	1.645	2.750
80	1.034	1.150	1.690	2.211	2.551
85	.929	1.024	1.783	2.387	2.348
90	.845	.881	1.829	2.441	2.172
95	.809	.740	1.828	2.451	2.014
100	.848	.669	1.787	2.436	1.865
105	.959	.763	1.723	2.393	1.728
110	1.114	1.000	1.676	2.304	1.604
115	1.279	1.273	1.695	2.135	1.492
120	1.437	1.519	1.787	1.831	1.385
125	1.577	1.718	1.917	1.400	1.321
130	1.698	1.872	2.049	1.011	1.239
135	1.797	1.977	2.164	.833	.935
140	1.874	2.064	2.251	.860	.650
145	1.926	2.107	2.304	.949	.744
150	1.953	2.116	2.316	1.027	.822
155	1.951	2.088	2.283	1.087	.875
160	1.920	2.032	2.206	1.142	.934
165	1.862	1.945	2.089	1.206	1.021
170	1.780	1.835	1.937	1.296	1.154
175	1.680	1.707	1.760	1.420	1.343
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

TABELA 3.4

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 3P1 DO ARGONIO

PARAMETRO DELTA

ANGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	.656	.824	.421	.032	.026
10	.487	.537	.274	.069	.084
15	.480	.445	.264	.223	.260
20	.535	.460	.502	.977	.238
25	.609	.608	.891	.422	.423
30	.785	.940	1.033	.509	1.174
35	.926	1.332	1.189	.548	.515
40	.973	1.453	1.331	.479	.452
45	.960	1.379	1.304	.479	.507
50	1.015	1.357	1.178	.515	.570
55	1.067	1.362	1.082	.550	.587
60	1.106	1.365	1.045	.550	.518
65	1.115	1.348	1.053	.506	.393
70	1.089	1.300	1.072	.677	.346
75	1.035	1.237	1.068	1.343	.369
80	.962	1.143	1.034	.917	.386
85	.883	1.023	.987	.678	.383
90	.819	.831	.949	.576	.364
95	.797	.740	.927	.543	.337
100	.845	.668	.924	.559	.318
105	.959	.762	.955	.627	.330
110	1.110	1.000	1.053	.762	.408
115	1.264	1.272	1.210	.989	.610
120	1.388	1.506	1.305	1.283	1.034
125	1.423	1.418	1.224	1.173	1.287
130	1.361	1.267	1.077	.900	.976
135	1.280	1.163	.939	.829	.830
140	1.211	1.077	.834	.809	.591
145	1.163	1.034	.771	.767	.431
150	1.140	1.026	.756	.737	.395
155	1.137	1.054	.794	.745	.423
160	1.184	1.109	.882	.802	.503
165	1.250	1.196	1.013	.914	.646
170	1.342	1.306	1.179	1.084	.872
175	1.451	1.434	1.368	1.309	1.189
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

TABELA 3.5

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 3P1 DO ARGONIO

PARAMETRO EPSILON

ANGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	1.025	1.144	.621	.046	.033
10	.883	.867	.475	.076	.071
15	.901	.812	.523	.142	.151
20	.978	.867	.666	.260	.311
25	1.095	.994	.894	.484	.745
30	1.243	1.180	1.209	.885	2.023
35	1.414	1.417	1.591	1.028	.940
40	1.593	1.691	1.955	.858	.780
45	1.753	1.968	2.152	.797	.821
50	1.868	2.189	2.104	.817	.881
55	1.919	2.279	1.915	.874	.878
60	1.908	2.223	1.701	.943	.797
65	1.858	2.081	1.504	.995	.696
70	1.790	1.916	1.351	1.001	.609
75	1.722	1.759	1.234	.971	.542
80	1.665	1.620	1.154	.941	.496
85	1.623	1.503	1.105	.926	.472
90	1.599	1.410	1.082	.927	.467
95	1.592	1.345	1.075	.945	.480
100	1.601	1.309	1.081	.983	.523
105	1.622	1.302	1.095	1.050	.619
110	1.651	1.319	1.115	1.161	.801
115	1.681	1.352	1.135	1.324	1.134
120	1.709	1.391	1.155	1.482	1.643
125	1.731	1.429	1.173	1.435	1.629
130	1.742	1.463	1.194	1.201	1.152
135	1.744	1.512	1.220	1.019	.853
140	1.735	1.511	1.253	.939	.684
145	1.718	1.527	1.294	.925	.604
150	1.694	1.540	1.340	.953	.588
155	1.667	1.551	1.391	1.013	.630
160	1.638	1.557	1.442	1.103	.731
165	1.612	1.563	1.491	1.226	.904
170	1.590	1.567	1.532	1.374	1.156
175	1.576	1.570	1.561	1.511	1.435
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

T A B E L A 3.6

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 1P1 DO ARGONIO

PARAMETRO LAMBDA

ANGULO	18.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	.999	.997	.998	1.000	1.000
5	.982	.958	.862	.701	.449
10	.929	.852	.569	.328	.134
15	.843	.699	.287	.099	.053
20	.726	.517	.107	.009	.305
25	.575	.317	.128	.356	.868
30	.397	.127	.399	.837	.997
35	.231	.045	.721	.925	.968
40	.196	.220	.898	.906	.946
45	.383	.553	.946	.883	.937
50	.639	.796	.928	.865	.926
55	.805	.906	.874	.841	.894
60	.877	.941	.799	.787	.812
65	.891	.938	.714	.633	.696
70	.873	.897	.631	.270	.623
75	.831	.874	.564	.064	.593
80	.767	.818	.514	.206	.584
85	.682	.740	.476	.341	.590
90	.574	.637	.441	.423	.607
95	.447	.505	.400	.477	.633
100	.314	.353	.348	.524	.669
105	.198	.206	.284	.579	.719
110	.122	.096	.220	.653	.788
115	.098	.044	.182	.746	.874
120	.123	.047	.187	.810	.954
125	.182	.091	.231	.701	.946
130	.262	.158	.294	.433	.689
135	.350	.247	.360	.270	.315
140	.441	.324	.426	.248	.255
145	.532	.414	.491	.303	.395
150	.619	.507	.559	.397	.551
155	.702	.602	.632	.516	.689
160	.777	.691	.709	.646	.808
165	.841	.773	.788	.773	.899
170	.890	.840	.859	.880	.958
175	.921	.884	.911	.952	.988
180	.932	.900	.930	.978	.997

TABELA 3.7

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O IP1 DO ARGONIO

PARAMETRO GUI-BARRA

ANGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	.000	.000	.000	.000	.000
5	.022	.066	.150	.017	.102
10	.030	.069	.219	.036	.352
15	.047	.074	.392	.110	1.374
20	.079	.075	.909	2.048	2.417
25	.142	.067	2.034	2.698	2.645
30	.280	.003	2.538	2.302	1.002
35	.636	1.304	2.640	1.472	.170
40	1.427	2.770	2.460	1.007	.261
45	2.007	2.860	1.731	.822	.438
50	2.155	2.922	1.165	.700	.702
55	2.057	3.064	.970	.551	1.090
60	1.675	2.422	1.016	.319	1.627
65	1.031	.855	1.142	.020	2.274
70	.576	.639	1.311	.513	2.861
75	.367	.485	1.496	2.139	2.991
80	.272	.407	1.665	3.116	2.676
85	.226	.336	1.801	2.898	2.434
90	.201	.265	1.898	2.814	2.237
95	.179	.194	1.963	2.782	2.062
100	.139	.124	2.013	2.782	1.899
105	.046	.059	2.073	2.817	1.746
110	.201	.014	2.212	2.914	1.598
115	.830	.034	2.468	3.120	1.425
120	1.552	2.612	2.795	2.462	1.013
125	1.863	2.749	3.047	1.487	.547
130	1.973	2.718	3.095	.841	.915
135	2.010	2.637	3.024	.298	.546
140	2.016	2.617	2.991	.168	.200
145	2.007	2.567	2.979	.468	.578
150	1.993	2.522	2.977	.634	.708
155	1.977	2.475	2.980	.721	.763
160	1.961	2.447	2.985	.767	.797
165	1.948	2.420	2.989	.790	.831
170	1.938	2.400	2.992	.800	.866
175	1.932	2.388	2.994	.804	.895
180	.000	.000	.000	.000	.000

TABELA 3.8

CÁLCULO DOS PARÂMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 1P1 DO ARGÔNIO

PARÂMETRO QOI-MC

ÂNGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	.198	.262	.188	.019	.102
10	.139	.170	.231	.040	.352
15	.141	.145	.397	.124	1.375
20	.170	.150	.917	2.017	2.415
25	.234	.194	2.013	2.685	2.633
30	.375	.394	2.465	2.294	1.104
35	.721	1.494	2.497	1.473	.223
40	1.443	2.370	2.253	1.013	.288
45	1.958	2.465	1.683	.831	.458
50	2.058	2.403	1.192	.713	.717
55	1.924	2.151	1.034	.571	1.097
60	1.632	1.734	1.056	.357	1.627
65	1.280	1.316	1.167	.152	2.269
70	.983	1.050	1.325	.551	2.846
75	.770	.829	1.499	2.044	2.962
80	.621	.654	1.661	2.852	2.656
85	.514	.560	1.791	2.829	2.428
90	.436	.447	1.884	2.776	2.233
95	.388	.342	1.946	2.750	2.060
100	.367	.267	1.994	2.747	1.898
105	.483	.293	2.053	2.765	1.745
110	.745	.524	2.168	2.805	1.598
115	1.170	1.090	2.370	2.783	1.428
120	1.559	1.858	2.592	2.321	1.065
125	1.788	2.273	2.729	1.494	.750
130	1.899	2.430	2.791	.877	.949
135	1.947	2.452	2.820	.392	.589
140	1.961	2.474	2.836	.298	.257
145	1.957	2.445	2.842	.516	.589
150	1.942	2.402	2.833	.664	.715
155	1.920	2.343	2.801	.749	.769
160	1.891	2.281	2.736	.799	.807
165	1.852	2.191	2.622	.836	.847
170	1.794	2.058	2.426	.889	.902
175	1.701	1.852	2.087	1.039	1.014
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

T A B E L A 3.9

CÁLCULO DOS PARÂMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 1P1 DO ARGÔNIO

PARÂMETRO DELTA

ÂNGULO	16.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	.196	.274	.114	.008	.007
10	.136	.155	.072	.018	.021
15	.133	.125	.070	.057	.068
20	.151	.130	.149	.352	.062
25	.187	.132	.294	.111	.113
30	.252	.394	.328	.138	.583
35	.372	1.274	.423	.157	.145
40	.475	.693	.624	.135	.123
45	.467	.601	.793	.135	.139
50	.555	.711	.604	.147	.157
55	.736	.988	.440	.160	.161
60	.936	1.353	.366	.163	.141
65	.980	1.176	.338	.150	.107
70	.848	.902	.329	.210	.094
75	.693	.702	.322	.563	.098
80	.566	.566	.312	.288	.102
85	.465	.457	.301	.198	.100
90	.389	.364	.292	.166	.095
95	.346	.284	.288	.157	.088
100	.362	.237	.290	.166	.083
105	.481	.287	.303	.194	.087
110	.722	.524	.344	.250	.110
115	.954	1.088	.410	.358	.180
120	.893	1.236	.436	.503	.413
125	.727	.796	.402	.420	.542
130	.605	.590	.347	.288	.299
135	.529	.491	.300	.259	.232
140	.436	.434	.267	.247	.162
145	.472	.419	.253	.227	.116
150	.483	.433	.262	.215	.106
155	.522	.480	.301	.220	.114
160	.595	.558	.376	.249	.139
165	.716	.685	.499	.311	.189
170	.906	.833	.703	.440	.294
175	1.193	1.180	1.048	.751	.564
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

T A B E L A 3.10

CALCULO DOS PARAMETROS DE ALINHAMENTO PARA O 1P1 DO ARGONIO

PARAMETRO EPSILON

ANGULO	10.0 EV	20.0 EV	30.0 EV	50.0 EV.	80.4 EV
0	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571
5	.315	.402	.171	.012	.008
10	.248	.253	.126	.019	.018
15	.251	.228	.139	.036	.038
20	.275	.243	.181	.066	.080
25	.317	.284	.255	.125	.200
30	.377	.350	.380	.242	1.059
35	.461	.449	.601	.296	.267
40	.578	.594	1.003	.243	.214
45	.745	.816	1.379	.227	.228
50	.980	1.151	1.108	.236	.247
55	1.286	1.670	.795	.259	.245
60	1.561	2.067	.611	.283	.220
65	1.561	1.800	.501	.295	.190
70	1.377	1.371	.433	.287	.165
75	1.151	1.061	.392	.271	.146
80	.974	.849	.370	.261	.132
85	.846	.699	.360	.258	.125
90	.755	.590	.359	.261	.122
95	.690	.513	.362	.272	.125
100	.645	.462	.367	.291	.137
105	.614	.431	.369	.326	.163
110	.595	.417	.367	.390	.216
115	.584	.416	.360	.512	.336
120	.580	.425	.353	.673	.693
125	.583	.440	.348	.563	.793
130	.591	.462	.350	.376	.381
135	.606	.501	.361	.291	.248
140	.628	.523	.381	.262	.189
145	.660	.567	.413	.259	.164
150	.706	.625	.460	.273	.159
155	.772	.705	.527	.303	.172
160	.868	.811	.624	.354	.206
165	1.009	.966	.772	.445	.274
170	1.208	1.131	1.003	.619	.416
175	1.444	1.434	1.339	1.011	.777
180	1.571	1.571	1.571	1.571	1.571

CAPÍTULO 4

Teoria de muitos Corpos em Segunda Ordem em Espalhamento
Inelástico de elétrons por átomos, 2^3S He

A teoria de muitos corpos em primeira ordem (FOMBT) usada para estudar o espalhamento inelástico de elétrons por átomos apresenta várias deficiências por não incluir efeitos considerados importantes na região de energia que nos interessa. Por exemplo os estados no contínuo são calculados com um potencial de Hartree-Fock, chamado de potencial direto e de troca. Certamente com tal descrição efeitos de polarização, estado final entre outros estão excluídos. As tentativas de se incluir efeitos além do Hartree-Fock tem uma longa história e recentemente Bransden e McDowell⁽⁸⁰⁾ num artigo de revisão, apresentam um apanhado dos modelos em uso para superar este problema. Observando-se os resultados obtidos pela aplicação da FOMBT aos estados com $n=2$ do He⁽⁸⁾ vê-se que os estados do tipo 3L são as que apresentam as maiores discrepâncias para os valores experimentais, mostrando que o único termo, de troca, usado para descrever este processo não é suficiente. Para incluir outros defeitos é natural que analisemos outros termos da expansão da qual a FOMBT é apenas o primeiro deles. Isto será feito numa teoria de muitos corpos em segunda ordem (SOMBT) como desenvolvida por Csanak e outros⁽⁸¹⁾.

Iniciamos com a expressão da matriz S (1-15)

$$S_{ug,op} = - \int d3 d3' d4 d4' f_q^{(G)*}(3) f_p^{(G)}(3') \Xi(34, 3'4') X_n^o(4'4)$$

Em primeira ordem os f são obtidos através de função de Green de uma partícula na aproximação Hartree-Fock (HF) e as $X_n^o(4'4)$ da função de Green de duas partículas na aproximação RPA. A solução de G_1 e G_2 não é auto-consistente, já que esta não é fundamental em física atômica. Existem várias alternativas de se colocar efeitos de ordem mais alta. Por exemplo se usarmos a auto energia Σ

$$\begin{aligned} \Sigma(1,1') &= i V(1-1') G_1(1,1') - i \delta(1-1') \int d3 V(1-3) G_1(3,3') \\ &+ i \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4) \frac{\delta \Sigma(4,1')}{\delta u(3)} \end{aligned} \quad 4.1$$

onde usando-se a definição de $\Xi(45,1'6) = \frac{\delta \Sigma(4,1')}{\delta G_1(6,5')}$

$$\begin{aligned} \Sigma(1,1') &= i V(1-1') G_1(1,1') - i \delta(1-1') \int d3 V(1-3) G_1(3,3') \\ &+ i \int d3 d4 d5 d6 V(1-3) G_1(1,4) \Xi(45,1'6) R(63,53') \end{aligned} \quad 4.2$$

pode-se conseguir uma auto energia Σ além da aproximação HF =

$$\Xi = \delta \Sigma / \delta G \cong \delta \Sigma_{HF} / \delta G$$

e R_2 na aproximação RPA. A equação de Dyson com esta aproximação de Σ definirá uma função de Green, G^{GRPA} , onde novos efeitos estão incluídos. A análise desta nova auto-energia foi efetuada por Csanak e Taylor⁽⁸²⁾ e foi usada para espalhamento elástico com He por Yarlagadda e outros⁽⁸³⁾ com excelentes resultados. Isto também pode ser feito em espalhamento inelástico usando-se os nossos f_p

na expressão da matriz S . Pode-se também ir além em \equiv usando-se para calcular este a nova auto energia Σ ou incluir estes efeitos na equação X_n^0 . A maneira com que introduziremos segue a segunda alternativa. Podemos escrever a matriz S como

$$S_{nq,op} = \frac{1}{i} \int d\lambda d\lambda' \int_q^{(q)^*} \int_p^{(p)} V_{0n}(1,1') \quad 4.3$$

onde

$$V_{0n}(1,1') = \frac{1}{i} \int dz dz' \equiv(1z,1'z') X_n^0(z',z) \quad 4.4$$

é chamado o potencial de transição⁽⁸¹⁾. Nós temos que

$$\frac{\delta \Sigma(1,1')}{\delta u(3)} = \int dz dz' \equiv(1z,1'z') R(z',z,3')$$

aplicando a operação de Gell Mann-Low teremos

$$\frac{1}{dn} \int_{t_3 \rightarrow \infty} \int d\lambda_3 \frac{\delta \Sigma_1(1,1')}{\delta u(3)} X_n^0(3,3') = \int dz dz' \equiv(1z,1'z') X_n^0(z',z) \quad 4.5$$

esta expressão quando substituída em 4.4 mostra que existe uma maneira de se introduzir outros efeitos não incluídos numa teoria de primeira ordem. Assim no nosso modelo usaremos G_1 na aproximação H-F, os X_n^0 na aproximação H.F. de caroço congelado, mas iremos mais longe na expansão de $\frac{\delta \Sigma}{\delta u}$ que numa teoria de primeira ordem, incluiremos termos em segunda ordem na interação V . Isto é uma essência o nosso modelo.

Para obter a expressão da matriz S , tomamos a equação 4.1 para Σ e fazendo uma interação teremos

A.m

$$\begin{aligned}
\Sigma(1,1') &= i V(1-1') G_1(1,1') - i \delta(1-1') \int d3 V(1-3) G_1(3,3^+) \\
&+ i \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4) + V(4-1') R(43,1'3^+) \\
&- i \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4') + V(1'-4) R(43,4'3^+) \\
&+ i \int d3 d4 d5 d5' V(1-3) G_1(1,4) V(4-5) R(43,5'3^+) \frac{\delta \Sigma(5',1)}{\delta u(5)} \\
&+ i \int d3 d4 d5 d5' V(1-3) G_1(1,4) V(4-5) G_1(4,5') \frac{\delta^2 \Sigma(5',1)}{\delta u(3) \delta u(5)}
\end{aligned}$$

onde negligenciamos os dois últimos termos assim

$$\begin{aligned}
\frac{\delta \Sigma(1,1')}{\delta u(2)} &= i V(1-1') R(12,1'2^+) - i \delta(1-1') \int d3 V(1-3) R(32,3^+2^+) \\
&- \int d3 d4 V(1-3) R(12,42^+) V(4-1') R(43,1'3^+) \\
&- \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4) V(4-1') R(432,1'3^+2^+) \\
&+ \int d3 d4 V(1-3) R(12,1'2^+) V(4-1') R(43,4'3^+) \\
&+ \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,1') V(4-1') R(432,4'3^+2^+) \quad 4.6
\end{aligned}$$

com a qual usando-se 4.4 e 4.5 obtêm-se

$$\begin{aligned}
V_{0n}(1,1') &= V(1-1') X_n^0(1,1') - \delta(1-1') \int d3 V(1-3) X_n^0(3,3^+) \\
&- \frac{1}{i} \int d3 d4 V(1-3) R(43,1'3^+) V(4-1') X_n^0(1,4) \\
&- \frac{1}{i} \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,4) V(4-1') R_n^{\mp}(43,1'3^+) \\
&+ \frac{1}{i} \int d3 d4 V(1-3) R(43,4'3^+) V(4-1') X_n^0(1,1') \\
&+ \frac{1}{i} \int d3 d4 V(1-3) G_1(1,1') V(4-1') R_n^{\mp}(43,4'3^+) \quad 4.7
\end{aligned}$$

onde* $R_n^I(43,1'3^+) = \frac{1}{dn} \int_{t_2 \rightarrow \infty} \int d\omega R(432,1'3^+2^+) X_n^0(2,2^+) \quad 4.8$

substituindo (4-7) na equação (4.3) obtêm-se a matriz S usada, na qual a dependência temporal pode ser integrada para obter-se a matriz T. Usamos

$$G_s(1,1') = G_s(n_s, n_s'; \epsilon_s - \epsilon_s') \quad X_n^0(1,1') = e^{i\omega_n T_1} X_n^0(n_s, n_s'; \epsilon_s)$$

$$R(43,4^+3^+) = \sum_{m \neq 0} \left[\theta(\epsilon_4 - \epsilon_3) X_0^m(4,4^+) X_m^0(3,3^+) + \theta(\epsilon_3 - \epsilon_4) X_0^m(3,3^+) X_m^0(4,4^+) \right]$$

$$R_n^I(43,4^+3^+) = i \sum_m \left[\theta(\epsilon_4 - \epsilon_3) X_n^m(4,4^+) X_m^0(3,3^+) + \theta(\epsilon_3 - \epsilon_4) X_n^m(3,3^+) X_m^0(4,4^+) \right] \\ - i \left[\langle n | \psi^\dagger(3) \psi(3) | 0 \rangle \langle 0 | \psi^\dagger(4) \psi(4) | 0 \rangle + \langle n | \psi^\dagger(4) \psi(4) | 0 \rangle \langle 0 | \psi^\dagger(3) \psi(3) | 0 \rangle \right]$$

obteremos uma matriz T como:

$$T_{nq,lop} = \sum_{i=1}^4 T_{nq,lop}^{(i)}$$

onde

$$T_{nq,lop}^{(1)} = \int dn_1 dn_2 \int q^{(s)*}(n_2) f_p^{(4)}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_1') \tilde{X}_n(n_1, n_1')$$

$$T_{nq,lop}^{(2)} = - \int dn_1 dn_2 \int q^{(s)*}(n_2) f_p^{(1)}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_1') \tilde{X}_n(n_1', n_2)$$

$$T_{nq,lop}^{(3)} = \sum_{m \neq 0, n} \int dn_1 dn_2 dn_3 dn_4 \int q^{(s)*}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) f_p^{(0)}(n_2) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) \tilde{G}(n_1, n_3; \epsilon_q + \omega_m) X_n^m(n_2, n_4) \tilde{X}_m(n_3, n_3)$$

$$T_{nq,lop}^{(4)} = \sum_{m \neq 0, n} \int dn_1 dn_2 dn_3 dn_4 \int q^{(s)*}(n_2) V(\vec{n}_2 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(n_2) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_4) \tilde{G}(n_1, n_3; \epsilon_p + \omega_m) X_n^m(n_3, n_3) \tilde{X}_m(n_4, n_4)$$

(*) No Apêndice D uma equação para R_n^1 é derivada.

$$T_{nq,op}^{(5)} = - \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^>(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p) \tilde{X}_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) [\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_4) - X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4)]$$

$$T_{nq,op}^{(6)} = - \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^<(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p) \tilde{X}_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) [\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_4) - X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4)]$$

$$T_{nq,op}^{(7)} = -i \sum_{m \neq 0} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) X_n^{0>}(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \frac{\epsilon_q + \epsilon_p}{2} + u_m) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$T_{nq,op}^{(8)} = -i \sum_{m \neq 0} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) X_n^{0<}(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \frac{\epsilon_q + \epsilon_p}{2} - u_m) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$T_{nq,op}^{(9)} = - \sum_{m \neq 0, n} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^<(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p - u_m) X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$T_{nq,op}^{(10)} = - \sum_{m \neq 0, n} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^>(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_q + u_m) X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$T_{nq,op}^{(11)} = \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^<(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_q) \tilde{X}_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) (\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_4) - X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4))$$

$$T_{nq,op}^{(12)} = \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) G_1^>(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p) \tilde{X}_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) (\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_4) - X_n^u(\vec{n}_3, \vec{n}_4))$$

$$T_{nq,op}^{(13)} = i \sum_{m \neq 0} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) X_n^{0>}(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \frac{\epsilon_p + \epsilon_q}{2} + u_m) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$T_{nq,op}^{(14)} = i \sum_{m \neq 0} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}'_1 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(5)*}(\vec{n}_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_3) f_p^{(4)}(\vec{n}'_1) V(\vec{n}'_1 - \vec{n}_4) X_n^{0<}(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \frac{\epsilon_p + \epsilon_q}{2} - u_m) X_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) \tilde{X}_m(\vec{n}_3, \vec{n}_4)$$

$$X_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) = \langle 0 | \psi^{\dagger}(\vec{n}_3) \psi(\vec{n}_4) | n \rangle$$

$$\tilde{X}_n(\vec{n}_3, \vec{n}_4) = \langle n | \psi^{\dagger}(\vec{n}_3) \psi(\vec{n}_4) | 0 \rangle$$

$$X_n^m(\vec{n}_3, \vec{n}_4) = \langle n | \psi^{\dagger}(\vec{n}_3) \psi(\vec{n}_4) | m \rangle$$

As expressões para $G_1^>$, $G_1^<$ estão no apêndice B e para $X^{0>} > X_n^{0>} >$ no apêndice C.

Pode-se analisar a matriz T obtida para se

ter idéia dos processos físicos levados em consideração⁽⁸¹⁾. Na aplicação específica que faremos, isto será discutido mais longamente. Assim de uma forma geral temos que $T^{(1)}$ e $T^{(2)}$ são os termos da primeira ordem de $T^{(3)}$ a $T^{(8)}$ temos processos diretos e $T^{(9)}$ a $T^{(14)}$ os processos de troca respectivos. $T^{(3)}$ corresponde a termos que violam o princípio de exclusão de Pauli, que surgem em expansões diagramáticas. $T^{(4)}$ representa dois tipos de efeito um de polarização do átomo outro de transferência de fluxo para os demais canais de espalhamento aberto. $T^{(5)}$ e $T^{(8)}$ representam o efeito do estado final e $T^{(7)}$ e $T^{(8)}$ são similares a $T^{(3)}$ e $T^{(4)}$ mas são de natureza dinâmica.

Nosso interesse volta-se para os estados 3L , isto implica que fazendo-se a análise de spin dos termos $T^{(1)}$, $T^{(3)}$, $T^{(4)}$, $T^{(5)}$, $T^{(6)}$ e $T^{(7)}$ termos que serão nulos. Para fazer o cálculo da matriz T restante exige-se um trabalho computacional ainda enorme de modo que em se tratando de uma primeira aplicação é interessante se conhecer os efeitos mais importantes que não são levados em consideração numa teoria de primeira ordem. As aplicações das teorias de muitos corpos para espalhamento elástico⁽⁸⁴⁻⁸⁷⁾ podem servir em uma primeira instância para a escolha dos termos mais importantes bem como uma aplicação em espalhamento inelástico no átomo de $H(2s, 2p)$ feita por Pindzola e Kelly⁽⁸⁸⁾ usando outra formulação para o problema. Em espalhamento elástico os termos de EPV são desprezíveis o que nós confirmamos num cálculo inicial para os $2'S$ do He. Assim dedicaremos maior atenção a dois termos $T^{(9)}$ e $T^{(12)}$ pois nestes

estão incluídos, efeitos de polarização, troca de fluxo com os canais abertos para espalhamento e interação do estado final. Poe e Chang⁽⁸⁶⁾ usando a teoria de muitos corpos incluíram efeitos de segunda ordem no potencial ótico obtendo bom acordo com os dados experimentais. Como nesta aplicação a energia do elétron incidente estava abaixo da energia de excitação o potencial ótico é real, não existe fluxo para outros canais. Posteriores aplicações como no caso do Ar⁽⁸⁵⁾ com energias mais altas onde este efeito surgiria foi considerado desprezível, isto não acontecerá no nosso caso. O efeito devido ao estado final foi apenas incluído via teoria de ondas distorcidas⁽²²⁾ e parece piorar a concordância com a experiência.

Assim em nosso modelo teremos

$$T = T^{(2)} + T^{(9)} + T^{(11)}$$

Para retirar a dependência no spin usamos o desacoplamento derivado no apêndice A, com o qual teremos

$$T_{nq,op}^{(2)} = - (-1)^{m_3 - m_3'} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{\frac{1}{2} m_p \frac{1}{2} m_q - m_3}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} S^n} \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' \int_g^{(-)*} f_g(\vec{n}_3') f_p^{(+)}(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') \tilde{X}_n(\vec{n}_3', \vec{n}_3)$$

$$T_{nq,op}^{(9)} = - \sum_m (-1)^{m_3 - m_3'} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{\frac{1}{2} m_p \frac{1}{2} m_q - m_3}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} S^n} \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' \int_g^{(-)*} f_g(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') f_p^{(+)}(\vec{n}_3')$$

$$V(\vec{n}_3' - \vec{n}_3') G(\vec{n}_3, \vec{n}_3'; \epsilon_p, \omega_m) X_n^{m,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_3) \tilde{X}_m(\vec{n}_3', \vec{n}_3') S_{S_1}^{m_1} S_{m_2}^{m_2} S_{m_3}^{m_3}$$

$$T_{nq,op}^{(11)} = (-1)^{m_3 - m_3'} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{\frac{1}{2} m_p \frac{1}{2} m_q - m_3}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} S^n} \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' \int_g^{(-)*} f_g(\vec{n}_3) V(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') f_p^{(+)}(\vec{n}_3') V(\vec{n}_3' - \vec{n}_3')$$

$$G(\vec{n}_3', \vec{n}_3'; \epsilon_g) \tilde{X}_n(\vec{n}_3', \vec{n}_3') (\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_3) - X_n^{m,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_3))$$

Nos apêndices E e F estão desenvolvidos em ondas parciais

os termos $T^{(9)}$ e $T^{(11)}$ que nos fornece para o caso n^3S do He

$$T_{ng,op}^{(9)} = -(-1)^{s^u - m_s^u} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p, m_q - m_s^u}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} s^u} \frac{2\pi^2}{\sqrt{pq}} \sum_{l_p} e^{i(\delta_{l_p}(p) + \delta_{l_p}(q))} R^l(p, q, l_p; n_s, l_s) P_p(\cos \theta)$$

$$T_{ng,op}^{(9)} = -(-1)^{s^u - m_s^u} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p, m_q - m_s^u}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} s^u} \frac{1}{\sqrt{pq}} \sum_{m_{lm}} \sum_{l_i} \sum_{l_p} e^{i(\delta_{l_p}(p) + \delta_{l_p}(q))} \begin{pmatrix} 1 & l_i & l_p \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$$

$$\left[P \int dk k \frac{R_{l_p}(q, l_p, n_s, k, l_i, m_{lm}) R_{l_i}(m_{lm}, k, l_i; p, l_p, l_s)}{E_p - E_q - E_{k, l_i}} \right. \\ \left. - i\pi R_{l_p}^{l_{lm}}(q, l_p, n_s, k, m_{lm}, l_i, m_{lm}) R_{l_i}^{l_{lm}}(m_{lm}, k, m_{lm}, l_i; p, l_p, l_s) \right] P_p(\cos \theta)$$

$$T_{ng,op}^{(11)} = -(-1)^{s^u - m_s^u} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p, m_q - m_s^u}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} s^u} \frac{2\pi^2}{\sqrt{pq}} \sum_{l_p} e^{i(\delta_{l_p}(p) + \delta_{l_p}(q))} P_p(\cos \theta)$$

$$\left[P \int dk k \frac{[R^0(q, l_p, n_s; k, l_p, n_s) - R^0(q, l_p, l_s; k, l_p, l_s)] R_{l_p}^0(p, k, l_p, n_s, l_s)}{E_q - E_k} \right. \\ \left. - i\pi [R^0(q, l_p, n_s; q, l_p, n_s) - R^0(q, l_p, l_s; q, l_p, l_s)] R_{l_p}^0(p, q, q, l_p, n_s, l_s) \right]$$

Com a matriz T agora detalhada nós podemos ver como são incluídos os novos efeitos. O termo $T^{(9)}$, como já mencionamos antes, dá origem a dois efeitos não incluídos numa primeira ordem; o termo $P \int dk \dots$ dá origem aos efeitos de polarização no espalhamento inelástico, isto pode ser entendido como se um elétron incidente excitasse o átomo para um estado m, l_m e um elétron no contínuo de momentum K , o átomo decai para o estado n_s e o elétron é espalhado com momentum q . Isto é apenas uma imagem já que por exemplo a energia não é conservada no estado intermediário (k, m_l, n_s) . Huo⁽⁸⁹⁾ num cálculo de segunda ordem usando uma teoria análoga a aproximação de Ochkur para a transição $1^1S \rightarrow 2^3S$,

mostrou que a contribuição do termo de segunda ordem é uma ordem de grandeza maior que o termo de primeira, para espalhamento frontal a 500 ev. usando estados intermediários sô do tipo P.

Na parte imaginária está o efeito dos canais abertos para energia E_p . ($\hbar\omega_j = \sqrt{2(E_p - \omega_j)}$). Numa análise do espalhamento como interferência de ondas parciais, um canal aberto influi em segunda ordem com a sua primeira ordem através de $R_1^l(j\ell j, k_0 j, \ell_1; p\ell p, 1s)$ multiplicado pela intensidade do acoplamento $R^{lj}(q\ell p, ns; k_0 j, \ell s, j\ell j)$. Desta forma este termo inclui o efeito dos demais canais perturbativamente dando origem a polarização e troca de fluxo com os canais abertos. Já o termo $T^{(12)}$ inclui o efeito do estado final, como numa diferença entre este e o estado inicial. Todos estes resultados nós levaram a escolher na soma dos estados intermediários estados do tipo p e s, no nosso caso 2^3p , 3^3P e 3^3S que supomos serem os que darão o maior efeito, isto fará com que $T^{(9)}$ seja escrito como:

$$T_{ngiop}^{(9)} = - (i) \frac{5\pi\hbar^2}{(-1)^{2+mp}} C_{-m_p m_g m_s}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}} \frac{2\pi^2}{\sqrt{p^2}} \sum_{\ell p, m} e^{i(\delta_{\ell p p} + \delta_{\ell p}^{(9)})} P_{\ell p}(\cos \theta)$$

$$\left\{ \frac{dR}{2\ell p+1} \left[P(dk R \frac{R'(q\ell p, 2s, k_{\ell p+1}, m_1)}{\epsilon_p - \omega_m - \epsilon_k} R^{p+1}(p\ell p, k_{\ell p+1}, m_1, 1s) \right. \right. \\ \left. \left. - i\pi R'(q\ell p, 2s, k_{\ell p+1}, m_1) R^{p+1}(p\ell p, k_{\ell p+1}, m_1, 1s) \right] \right.$$

$$\frac{d\ell p+1}{2\ell p+3} \left[P(dk R \frac{R'(q\ell p, 2s, k_{\ell p+1}, m_1)}{\epsilon_p - \omega_m - \epsilon_k} R^{p+1}(p\ell p, k_{\ell p+1}, m_1, 1s) \right.$$

$$\left. - i\pi R'(q\ell p, 2s, k_{\ell p+1}, m_1) R^{p+1}(p\ell p, k_{\ell p+1}, m_1, 1s) \right]$$

A.M

ção de curto alcance ao 2^3P , bem como o fluxo entre os dois estados este em oposição ao caso elástico⁽⁸⁵⁾. Se for incluído agora o efeito da interação do estado final o resultado piora. Como primeira aplicação desta teoria, mesmo apenas este resultado é indicativo de quais efeitos físicos são mais importantes neste processo. Na figura 4.2 temos o resultado final. O cálculo de Bhadra, Callaway e Henry⁽⁹¹⁾ usando acoplamento forte (close coupling), fornece para esta transição boa concordância quantitativa com os resultados experimentais. Eles atribuem este acordo ao acoplamento entre os estados 2^3S , 2^3P , semelhante a nossa conclusão. Outros modelos não fornecem resultados comparáveis⁽⁸⁰⁾.

JMM

P.M.

Como conclusão esperamos que este seja um primeiro passo para outros estudos sobre o tema, no qual este resultado é apenas uma primeira indicação.

FIGURA 4.1

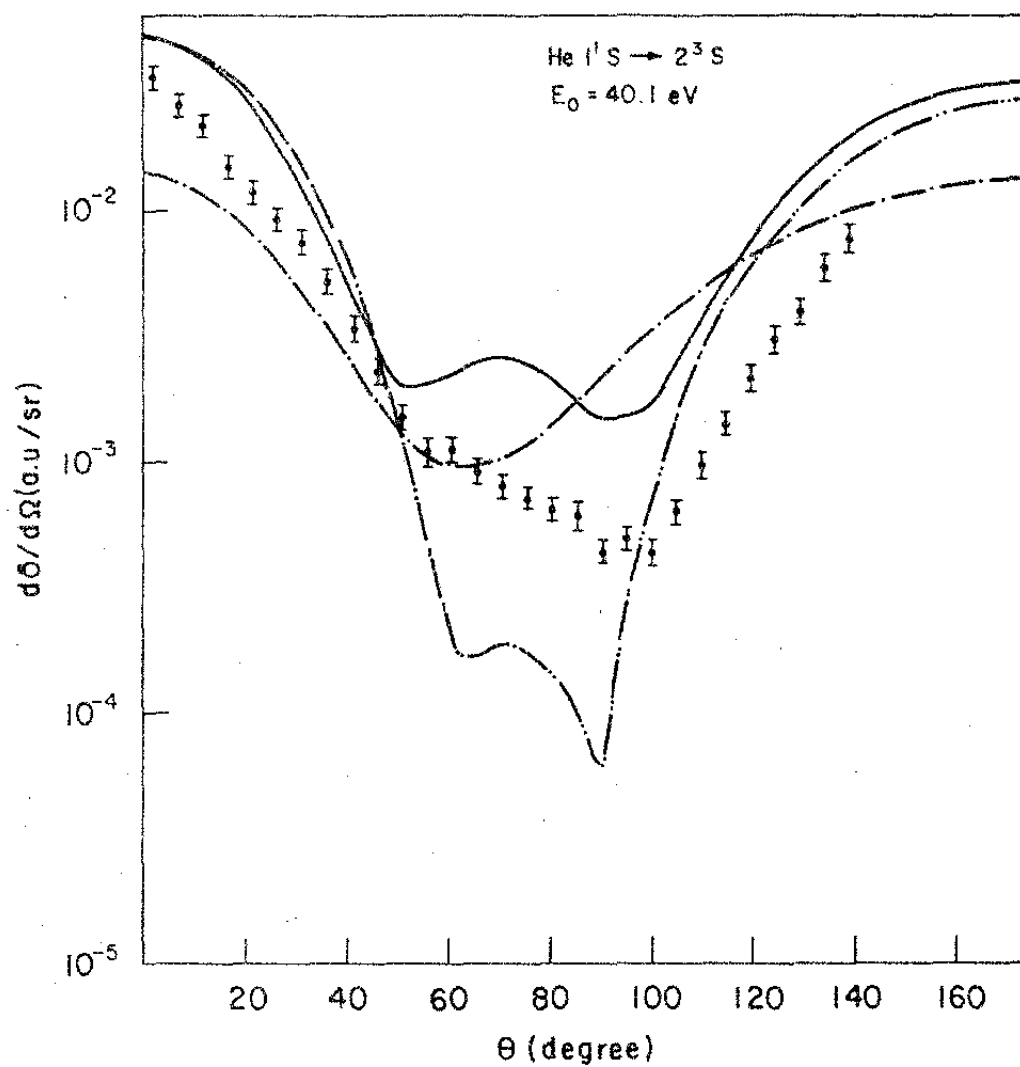


TABELA 4.1

SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL PARA 235 DO HÉLIO

ÂNGULO	A	B	C	D
0.0	0.1402E-01	0.4833E-01	0.4859E-01	0.5730E-01
10.0	0.1232E-01	0.4271E-01	0.4207E-01	0.5029E-01
20.0	0.8455E-02	0.2924E-01	0.2712E-01	0.3408E-01
30.0	0.4731E-02	0.1520E-01	0.1276E-01	0.1813E-01
40.0	0.2382E-02	0.5636E-02	0.4168E-02	0.8481E-02
50.0	0.1293E-02	0.1263E-02	0.1991E-02	0.5248E-02
60.0	0.9354E-03	0.1770E-03	0.2286E-02	0.5427E-02
70.0	0.9954E-03	0.1958E-03	0.2708E-02	0.6127E-02
80.0	0.1410E-02	0.1500E-03	0.2284E-02	0.6041E-02
90.0	0.2206E-02	0.6085E-04	0.1527E-02	0.5453E-02
100.0	0.3381E-02	0.6391E-03	0.1617E-02	0.5477E-02
110.0	0.4675E-02	0.2690E-02	0.3556E-02	0.7159E-02
120.0	0.6576E-02	0.6170E-02	0.7646E-02	0.1086E-01
130.0	0.8349E-02	0.1096E-01	0.1349E-01	0.1915E-01
140.0	0.1002E-01	0.1623E-01	0.1783E-01	0.2206E-01
150.0	0.1148E-01	0.2105E-01	0.2587E-01	0.2757E-01
160.0	0.1261E-01	0.2486E-01	0.3566E-01	0.3190E-01
170.0	0.1333E-01	0.2724E-01	0.3869E-01	0.3460E-01
180.0	0.1357E-01	0.2805E-01	0.3472E-01	0.3552E-01

A - Primeira ordem

B - Inclusão da polarização do 2^3P C - Inclusão do fluxo do 2^3P

D - Inclusão do estado final

REFERÊNCIAS

- 1) A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov e I. E. Dzyaloshinskii, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics. (Dover, 1975).
- 2) P. C. Martin e J. Schwinger, Phys. Rev., 115, 1342 (1959).
- 3) L. D. Kadanoff e G. Baym, Quantum Statistical Mechanics (W. A. Benjamin, 1976).
- 4) H. P. Kelly, Phys. Rev. 131, 684 (1963), 136 B, 896 (1964)
- 5) M. Ya. Amusia e N. A Cherepkov, Case Studies in Atomic Physics 5, 47 (1975).
- 6) Many-body Theory of Atomic Systems, Proceedings of Nobelsymposium 46, Ed. I. Lindgren e S. Lindqvist, Phys. Scrip. 21, No 314 (1980).
- 7) Gy. Csanak, H. S. Taylor e R. Yaris, Phys. Rev. A3, 1322 (1971).
- 8) L.D. Thomas, Gy. Csanak, H. S. Taylor e B. Yarlagadda, N. Phys. B7, 1719 (1974).
- 9) A. Chutjian e L. D. Thomas, Phys. Rev. A11, 1583 (1975).
- 10) G. P. Menezes, N.T. Padial e Gy. Csanak, J. Phys. B 11, L 237 (1978).
- 11) N. T. Padial, G. D. Menezes, F. J. da Paixão, Gy. Csanak e D. Cartwright, Phys. Rev., A 00, 000 (1980).
- 12) P. Roman, Introduction to Quantum Field Theory (John Wiley, 1969).
- 13) J. S. Bell e E. J. Squires, Phys. Rev. Lett. 3, 96 (1959)

- 14) M. Namiki, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 23, 629 (1960),
T. Kato, T. Kobayashi e M. Namiki, ibid supp. 15, 3 (1969).
- 15) J. Schwinger Proc. Nat. Acad. Sci. U.S. 37, 452 (1951).
- 16) Gy. Csanak, H. S. Taylor e R. Yaris, Adv. Atom. Mol. Phys. 7, eds D.R. Bates e J. Esterman (Academic Press, 1971) p. 287.
- 17) M. Gell-Mann e F. Low, Phys. Rev. 84, 350 (1951).
- 18) Gy. Csanak, H. S. Taylor e D. N. Tripathy, J. Phys. B 6, 2040 (1973).
- 19) P. L. Altick e A. E. Glassgold, Phys. Rev. 133, 632 (1964).
- 20) T. H. Dunning e V. Mckoy, J. Chem. Phys. 47, 1735 (1967).
- 21) T. N. Rescigno, C. W. McCurcly e V. Mckoy, J. Phys. B 7, 2396 (1974).
- 22) D. H. Madison e W. N. Shellon, Phys. Rev. A 7, 499 (1973).
- 23) G. D. Menezes, Tese de Doutorado, UNICAMP (1978).
- 24) Clementi e Roetti, Atomic Data
- 25) C. Froese Fischer Comp. Phys. Comm. 14, 145 (1978).
- 26) V. Mckoy Comunicação Privada.
- 27) G. N. Bates, Comp. Phys. Comm. 8, 220 (1974).
- 28) A. Pochat, D. Rozuel e J. Peresse, J. de Physique 34, 701 (1973).
- 29) M. R. C. McDowell, L. A. Morgan e V. P. Myerscough, J. Phys. B 6, 1435 (1973).
- 30) T. Scott e M. R. C. McDowell, J. Phys. B 8, 1851 (1975).

- 31) R. Marriot, Proc. Phys. Soc. 87, 407 (1966).
- 32) Y. K. Kim e M. Inokuti, Phys. Rev. 181, 205 (1969).
- 33) M. R. Flannery, W. F. Morrison e B. L. Richmond, J. Appl. Phys. 46, 1186 (1975)
- 34) M. R. Flannery e K. J. McCann, Phys. Rev. A 12, 846 (1975).
- 35) P. Ton-That, S. T. Manson e M. R. Flannery, J. Phys B 14, 621 (1977).
- 36) S. T. Chen e G. A. Khayrallah, Phys. Rev. A 14, 1639 (1976).
- 37) G. A. Khayrallah, S. T. Chen e J. R. Rumble Jr, Phys Rev. A 17, 513 (1978).
- 38) H. G. Wilson e W. L. Williams, J. Phys. B 9, 423 (1976).
- 39) R. H. Neynaber, S. M. Trujillo, L.L. Marinov e E. W. Roth nos "Proceedings of the Third International Conference of the Physics of Electronic and Atomic Collisions". Editor M. R. C. McDowell, Willey, 1964, pg. 1089.
- 40) M. L. Lake e A. Garscadden, Bull, Am. Phys. Soc. 21, 157 (1976).
- 41) Gy. Csanak, J. Phys. B 7, 1289 (1974).
- 42) D. J. Rowe, Rev. Mod. Phys. 40, 153 (1968).
- 43) D. L. Yeager, M. A. C. Nascimento e V. Mckoy, Phys. Rev. A , (1975).
- 44) Gy. Csanak, Tese de Doutorado, USC (1971) não publicado.
- 45) A. R. Edmonds, "Angular Momentum in Quantum Mechanics"

(1957) Princeton.

- 46) Gy. Csanak, J. Phys. B 7, L 203 (1974).
- 47) T. N. Chang e R. T. Poe, J. Comp. Phys. 12, 557 (1973).
- 48) R. Courant e D. Hilbert, Methods of Mathematical Physycs, (Interscience, 1953).
- 49) D. C. Carlwright, F. J. da Paixão e Gy. Csanak (em andamento).
- 50) H. Ehrhardt, M. Schulz, T. Tekaar e K. Willmams, Phys. Rev. Lett. 22, 89 (1969).
- 51) J. H. Macek e P. H. Jaecks, Phys. Rev. A 4, 2288 (1971).
- 52) J. Wykes, J. Phys. B 5, 1126 (1972).
- 53) U. Fano e J. H. Macek, Rev. Mod. Phys. 45, 553 (1973).
- 54) M. Eminyan, K. B. MacAdam, J. Slevin e H. Kleinpoppen, Phys. Rev. Lett. 31, 576 (1973), idem, J. Phys. B 7, 1519 (1974), idem J. Phys. B 8, 2058 (1975).
- 55) M. C. Standage e H. Kleinpoppen, Phys. Rev. Lett. 36, 577 (1976).
- 56) A. Ugbabe, H. Arriola, P. J. O. Tenbner e E. Weigold, J. Phys, B 10, 72 (1977).
- 57) K. T. Tan, J. Fryar, P. S. Farago e J. W. McConkey, J. Phys. B 10, 1073 (1977).
- 58) V. C. Sutcliffe, G. N. Haddad, N. C. Steph e D. E. Golden, Phys. Rev. A 17, 100 (1978).
- 59) M. T. Hollywood, A. Crowe e J. F. Williams, J. Phys. B 12, 819 (1979).

- 60) I. McGregor e H. Kleinpoppen em : Coherence and Correlation in Atomic Collisions, eds H. Kleinpoppen e J. F. Williams (Plenum, 1980).
- 61) I. C. Malcolm e J. W. McConkey, J. Phys. B 12, 511 (1979).
- 62) A. Zaidi, I. McGregor e H. Kleinpoppen, XI JPEAC, Kyoto (1979).
- 63) K. Blum e H. Kleinpoppen, J. Phys. B 8, 922, (1975).
- 64) K. Blum e H. Kleinpoppen, Phys. Rep. 32, 203 (1979).
- 65) K. Siegbahn, Alpha, Beta and Gamma Ray Spectroscopy (North-Holland, 1968).
- 66) I. C. Malcolm e J. W. McConkey, J. Phys. B12, L 67, (1979).
- 67) N. T. Padial (Tese de Doutorado) UNICAMP 1978.
- 68) A. Chutjian e D. C. Cartwright, Phys. Rev. A XX, XXX (1980).
- 69) I. C. Percival e M. J. Seaton, Phil. Trans. Roy Soc. (London), Ser. A 251, 113 (1958).
- 70) D. M. Brink e G. R. Satchler, Angular Momentum (Oxford, 1975).
- 72) H. W. Hermann e I. V. Hertel in Coherence and Coorelation in Atomic Collisions, Edited by H. Kleinpoppen e J. F. Williams (Plenum, 1980).
- 73) L. A. Morgan e M. R. C. McDowell, Comm. Atom. Mol. Phys. 7, 123 (1978).
- 74) A. Pochat, F. Gelebart e J. Peresse, J. Phys. B 13, L 79 (1980).

- 75) K. Blum, F. J. da Paixão e Gy Csanak, J. Phys. B 13, L257 (1980).
- 76) A. Kastler, Ann. Phys. (Paris), 2, 114 (1967).
- 77) J. C. Lehman, Ann. Phys. (Paris), 2, 345 (1967).
- 78) a) F. J. da Paixão, N. T. Padial, Gy. Csanak e K. Blum, trabalho apresentado na 7a. Conferência Internacional de Física Atômica, MII, Agosto, 1980.
b) F. J. da Paixão, N. T. Padial, Gy. Csanak e K. Blum a ser publicado.
- 79) M. Born e E. Wolf, Principles of Optics (Pergamon, 5a Edição, 1975).
- 80) B. H. Bransden e M. R. C. McDowell, Phys. Rep. 30C, 207 (1977).
- 81) Gy. Csanak H. S. Taylor e D. N. Tripathy, J. Phys. B 6, 2040 (1973)
Gy. Csanak e H. S. Taylor, J. Phys. B 6, 2055 (1973).
- 82) Gy. Csanak e H. S. Taylor, Phys. Rev. A 6, 1843 (1972).
- 83) B. S. Yarlagadda, Gy. Csanak, H. S. Taylor, B. Schneider e R. Yaris, Phys. Rev. A 7, 146 (1973).
- 84) H. P. Kelly, Phys. Rev. 160, (1967); Phys. Rev. 171, 54 (1968).
- 85) M. S. Pindzola e H.P. Kelly, Phys. Rev. A 9, 323 (1974).
- 86) R. T. Poe e E. S. Chang, Phys. Rev. 151, 31 (1966).
- 87) M. Knowles e M. R. C. McDowell, J. Phys. B 6, 300 (1973).

- 88) M.S. Pindzola e H. P. Kelly , Phys. Rev. A 11, 221 (1975).
- 89) W. M. Huo, J. Chem. Phys. 60, 3544 (1974).
- 90) S. Trajmar, Phys. Rev. A 8, 191 (1973).
- 91) K. Bhadra, J. Callaway e R. J. W. Henry, Phys. Rev. A 19, 1841 (1975).

APÊNDICE A

Análise de spin das amplitudes de Bethe-Salpeter

$$X_n^m(n'_1, n_1) = \langle n | \Psi^+(n'_1) \Psi(n_1) | m \rangle$$

Expandimos os operadores de campo

$$\Psi(n_1) = \sum_{b m_s} \phi_b(\vec{n}_1) \gamma_{m_s}(\sigma_1) a_{b m_s}$$

$$\Psi^+(n'_1) = \sum_{b' m'_s} \phi_b^*(\vec{n}'_1) \gamma_{m'_s}^*(\sigma'_1) a_{b' m'_s}^+$$

Onde γ_{m_s} representa as funções de spin α e β para $m_s = +1/2$ e $-1/2$, a é um operador de destruição de um elétron de componente de spin m_s e demais números quânticos estão em b .

$$X_n^m(n'_1, n_1) = \sum_{b, b'} \sum_{m'_s, m_s} \phi_b^*(\vec{n}'_1) \phi_b(\vec{n}_1) \gamma_{m'_s}^*(\sigma'_1) \gamma_{m_s}(\sigma_1) \langle n | a_{b' m'_s}^+ a_{b m_s} | m \rangle$$

Usando as propriedades de transformação dos operadores a^+ e a (1) definimos

$$T_{bb'q}^k = \sum_{m'_s, m_s} (-1)^{\frac{1}{2} + m_s} C_{m'_s - m_s q}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} k} a_{b' m'_s}^+ a_{b m_s}$$

$$X_n^m(n'_1, n_1) = \sum_{b, b'} \sum_{k, q} (-1) \phi_b^*(\vec{n}'_1) \phi_b(\vec{n}_1) (-1)^{k-q} \sum_{\sigma'_1, \sigma_1} \gamma_{m'_s}^*(\sigma'_1) \gamma_{m_s}(\sigma_1) \langle n | T_{bb'q}^k | m \rangle$$

onde $\sum_{k, q} \gamma_{m'_s}^*(\sigma'_1) \gamma_{m_s}(\sigma_1) = \sum_{m'_s, m_s} (-1)^{\frac{1}{2} + m_s} C_{m'_s - m_s - q}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} k} \gamma_{m'_s}^*(\sigma'_1) \gamma_{m_s}(\sigma_1)$

podemos usar o Teorema de Wigner-Eckart, levando em consideração que usamos uma teoria não relativística no hamiltoniano não existem termos que dependem do spin implicando que o momentum angular L e sua componente M_L o spin total S e sua componente M_s são bons números quânticos. Isto implica em poder ser usado o teorema de Wigner-Eckart apenas para

a parte de spin.

$$\langle n | T_{bb}^k | m \rangle = C_{q M_S^m M_S^n}^{k S^m S^n} \langle n || T_{bb}^k || m \rangle$$

$$X_n^{m,k}(\vec{n}_1, n_1) = \sum_{kq} (-1)^{k-q} C_{q M_S^m M_S^n}^{k S^m S^n} \sum_{k-q} (S_1^1, S_1^1) X_n^{m,k}(\vec{n}_1, \vec{n}_1)$$

$$X_n^{m,k}(\vec{n}_1, \vec{n}_1) = \sum_{bb} (-1) \phi_b^x(\vec{n}_1) \phi_b(\vec{n}_1) \langle n || T_{bb}^k || m \rangle$$

No caso de $|n\rangle$ ou $|m\rangle$ serem o estado fundamental, obtem-se os resultados conhecidos (2)

$$\tilde{X}_n(\vec{n}_1, n_1) = (-1)^{S_1^1 - M_S^n} \sum_{S_1^1, -M_S^n} (S_1^1, S_1^1) \tilde{X}_n(\vec{n}_1, \vec{n}_1)$$

$$X_m(\vec{n}_1, n_1) = \sum_{S_1^1, M_S^n} (S_1^1, S_1^1) X_m(\vec{n}_1, \vec{n}_1)$$

Método similar pode ser usado para o momentum angular orbital.

(1) B. Judd, Second Quantization and Atomic Spectroscopy

(Johns Hopkins, 1967)

(2) Gy. Csanak, Tese de Doutorado (U.S.C.) não publicado.

APÊNDICE B

Transformada de Fourier de $G(1,1')$

$$G_1(1,1') = (\omega)^{-1} \langle 0 | T(\psi^\dagger(1) \psi(1')) | 0 \rangle$$

$$G_1(1,1') = (\omega)^{-1} \theta(t_1 - t'_1) \langle 0 | \psi(1) \psi^\dagger(1') | 0 \rangle - i \theta(t'_1 - t_1) \langle 0 | \psi^\dagger(1') \psi(1) | 0 \rangle$$

$$\tau_1 = t_1 - t'_1$$

$$\tau_1 = (t_1 + t'_1) / 2$$

$$\langle 0 | \psi(1) = e^{iH\tau_1} \psi(n_1) e^{-iH\tau_1}$$

$$\psi^\dagger(1') = e^{iH\tau'_1} \psi^\dagger(n'_1) e^{-iH\tau'_1}$$

$$\langle 0 | \psi(1) \psi^\dagger(1') | 0 \rangle = \langle 0 | \psi(n_1) e^{-i(H-E_0^N)\tau_1} \psi^\dagger(n'_1) | 0 \rangle$$

$$= \sum_m e^{-iE_m^{N+1}\tau_1} \langle 0 | \psi(n_1) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(n'_1) | 0 \rangle$$

$$= \sum_m e^{-iE_m^{N+1}\tau_1} f_m(n_1) f_m^*(n'_1)$$

$$f_m(1) = \langle 0 | \psi(1) | m \rangle = e^{-i(E_m^{N+1} - E_0^N)\tau_1} \langle 0 | \psi(n_1) | m \rangle = e^{-iE_m^{N+1}\tau_1} f_m(n_1)$$

$$\langle 0 | \psi^\dagger(1') \psi(1) | 0 \rangle = \langle 0 | \psi^\dagger(n'_1) e^{i(H-E_0^N)\tau_1} \psi(n_1) | 0 \rangle$$

$$= \sum_\alpha e^{iE_\alpha^{N+1}\tau_1} \langle 0 | \psi^\dagger(n'_1) | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi(n_1) | 0 \rangle$$

$$= \sum_\alpha e^{iE_\alpha^{N+1}\tau_1} g_\alpha^*(n'_1) g_\alpha(n_1)$$

$$g_\alpha(1) = \langle \alpha | \psi(1) | 0 \rangle = e^{i(E_\alpha^{N+1} - E_0^N)\tau_1} \langle \alpha | \psi(n_1) | 0 \rangle = e^{iE_\alpha^{N+1}\tau_1} g_\alpha(n_1)$$

$$G_1(1,1') = (\omega)^{-1} \theta(\tau_1) \sum_k e^{-iE_k\tau_1} f_k(n_1) f_k^*(n'_1) - (\omega)^{-1} \theta(-\tau_1) \sum_\alpha e^{-iE_\alpha\tau_1} g_\alpha(n_1) g_\alpha^*(n'_1)$$

fazendo a transformada de Fourier

$$G_j(n_s, n'_s; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz G_j(n_s, n'_s; z) e^{i\omega z}$$

Usando

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-i\epsilon_E z} e^{i\omega z} \theta(z) = \frac{i}{\omega - \epsilon_E + i\eta}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-i\epsilon_x z} e^{i\omega z} \theta(-z) = \frac{-i}{\omega - \epsilon_x - i\eta}$$

Teremos

$$G_j(n_s, n'_s; \omega) = G_j^>(n_s, n'_s; \omega) + G_j^<(n_s, n'_s; \omega)$$

$$G_j^>(n_s, n'_s; \omega) = \sum_x \frac{f_x(n_s) q_x^*(n'_s)}{\omega - \epsilon_x - i\eta}$$

$$G_j^<(n_s, n'_s; \omega) = \sum_k \frac{f_k(n_s) f_k^*(n'_s)}{\omega - \epsilon_k + i\eta}$$

APÊNDICE C

Análise de Fourier para a amplitude de Bethe-Salpeter.

$$X_n^0(1,1) = \langle n | T(\psi(x) \psi^\dagger(x)) | 0 \rangle = \theta(x_1 - x_2) \langle n | \psi(x) \psi^\dagger(x) | 0 \rangle - \theta(x_2 - x_1) \langle n | \psi^\dagger(x) \psi(x) | 0 \rangle$$

$$X_n^0(1,1) = \sum_m \left\{ \theta(x_1 - x_2) \langle n | \psi(x) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(x) | 0 \rangle - \theta(x_2 - x_1) \langle n | \psi^\dagger(x) | m \rangle \langle m | \psi(x) | 0 \rangle \right\}$$

$$\langle n | \psi(x) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(x) | 0 \rangle = e^{i(E_n^N - E_m^{N+1})\xi_1} e^{i(E_m^{N+1} - E_0^N)\xi_2} \langle n | \psi(x_1) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(x_2) | 0 \rangle$$

Define-se

$$\langle n | \psi(x_1) | m \rangle = f_m^n(x_1) \quad \text{e} \quad \langle m | \psi^\dagger(x_2) | 0 \rangle = f_m^{*}(x_2)$$

$$\langle n | \psi^\dagger(x) | m \rangle \langle m | \psi(x) | 0 \rangle = e^{i(E_n^N - E_m^{N+1})\xi_1} e^{i(E_m^{N+1} - E_0^N)\xi_2} \langle n | \psi^\dagger(x_1) | m \rangle \langle m | \psi(x_2) | 0 \rangle$$

Define-se

$$\langle n | \psi^\dagger(x_1) | m \rangle = g_m^{n*}(x_1) \quad \text{e} \quad \langle m | \psi(x_2) | 0 \rangle = g_m(x_2)$$

Fazendo a mudança $\tau_1 = \tau_1 - \tau_2$ $T_1 = (\tau_1 + \tau_2) / 2$

$$(E_n^N - E_m^{N+1})\xi_1 + (E_m^{N+1} - E_0^N)\xi_2 = \omega_n T_1 + (E_m^{N+1} - \omega_n / 2) \tau_1$$

$$(E_n^N - E_m^{N+1})\xi_1 + (E_m^{N+1} - E_0^N)\xi_2 = \omega_n T_1 - (E_m^{N+1} - \omega_n / 2) \tau_1$$

Assim

$$\langle n | \psi^\dagger(x) | m \rangle \langle m | \psi(x) | 0 \rangle = e^{i\omega_n T_1} e^{i(E_m^{N+1} - \omega_n / 2)\tau_1} g_m^{n*}(x_1) g_m(x_2)$$

e

$$\langle n | \psi(x) | m \rangle \langle m | \psi^\dagger(x) | 0 \rangle = e^{i\omega_n T_1} e^{-i(E_m^{N+1} - \omega_n / 2)\tau_1} f_m^n(x_1) f_m^{*}(x_2)$$

$$E_m^{N+1} = E_E$$

$$E_m^{N+1} = -E_\alpha$$

$$X_n^0(j, j') = e^{i\omega_n T_1} \left\{ \sum_k \theta(\tau_1) e^{i(\omega_n/2 - \epsilon_k) \tau_1} f_k^n(n_j) f_k^{*}(n_{j'}) \right. \\ \left. - \sum_\alpha \theta(-\tau_1) e^{i(\omega_n/2 + \epsilon_\alpha) \tau_1} g_\alpha^n(n_j) g_\alpha(n_{j'}) \right\}$$

$$X_n^0(j, j') = e^{i\omega_n \bar{T}_1} X_n^0(n_j, n_{j'}; \tau_1)$$

$$X_n^0(n_j, n_{j'}; \tau_1) = \sum_k \theta(\tau_1) e^{i(\omega_n/2 - \epsilon_k) \tau_1} f_k^n(n_j) f_k^{*}(n_{j'}) \\ - \sum_\alpha \theta(-\tau_1) e^{i(\omega_n/2 + \epsilon_\alpha) \tau_1} g_\alpha^n(n_j) g_\alpha(n_{j'})$$

Fazendo a transformada de Fourier

$$X_n^0(n_j, n_{j'}; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega \tau} X_n^0(n_j, n_{j'}; \tau)$$

$$X_n^0(n_j, n_{j'}; \omega) = X_n^{0>}(n_j, n_{j'}; \omega) + X_n^{0<}(n_j, n_{j'}; \omega)$$

$$X_n^{0>}(n_j, n_{j'}; \omega) = i \sum_\alpha \frac{g_\alpha^{n*}(n_j) g_\alpha(n_{j'})}{\omega - \epsilon_\alpha - \omega_n/2 - i\eta}$$

$$X_n^{0<}(n_j, n_{j'}; \omega) = i \sum_k \frac{f_k^n(n_j) f_k^{*}(n_{j'})}{\omega - \epsilon_k + \omega_n/2 + i\eta}$$

APÊNDICE D

Resposta Quadrática

$$R(123, 1'2'3') = \frac{\delta^2 G_1(1,1')}{\delta u(2) \delta u(3)} \Big|_{u=0}$$

Queremos obter uma expressão para $R_n^I(12, 1', 2')$

$$R_n^I(12, 1'2') = \frac{1}{dn} \oint_{t_3 \rightarrow \infty} dn_3 R(123, 1'2'3') X_n^0(3, 3')$$

$$\frac{\delta G_1(1,1')}{\delta u(2)} \Big|_{u=0} = R(12, 1'2') = -G_2(12, 1'2') + G_1(1,1') G_1(2,2')$$

$$\frac{\delta^2 G_1(1,1')}{\delta u(2) \delta u(3)} \Big|_{u=0} = - \frac{\delta G_2(12, 1'2')}{\delta u(3)} \Big|_{u=0} + R(13, 1'3') G_1(2,2') + G_1(1,1') R(23, 2'3')$$

$$\frac{\delta G(12, 1'2')}{\delta u(3)} \Big|_{u=0} = -G_3(123, 1'2'3') + G_2(12, 1'2') G_1(3, 3')$$

$$R(123, 1'2'3') = G_3(123, 1'2'3') - G_2(12, 1'2') G_1(3, 3') \\ + R(13, 1'3') G_1(2,2') + G_1(1,1') R(23, 2'3')$$

Temos a relação

$$X_n^0(1,1') = \frac{1}{dn} \oint_{t_2 \rightarrow \infty} dn_2 R(12, 1'2') X_n^0(2, 2')$$

Assim

$$\frac{1}{dn} \oint_{t_3 \rightarrow \infty} dn_3 R(13, 1'3') X_n^0(3, 3') = X_n^0(1, 1')$$

$$\frac{1}{dn} \oint_{t_3 \rightarrow \infty} dn_3 R(23, 2'3') X_n^0(3, 3') = X_n^0(2, 2')$$

$$\frac{1}{dn} \lim_{t_3 \rightarrow \infty} \int dt_3 G(3,3') X_n^0(3,3') = 0$$

A função de Green de 3 partículas

$$G_3(123, 1'2'3') = (i)^3 \langle 0 | T(\psi(1)\psi(2)\psi(3)\psi^\dagger(3')\psi^\dagger(2')\psi^\dagger(1')) | 0 \rangle$$

Que pode ser escrita como

$$G_3(123, 1'2'3') = (i)^3 \Theta(t_3 - t_1) \sum_m X_m^0(3,3') \langle m | T(\psi(1)\psi(2)\psi^\dagger(2')\psi^\dagger(1')) | 0 \rangle$$

+ outras ordenações que não interessarão

$$\frac{1}{dn} \lim_{t_3 \rightarrow \infty} \int dt_3 G(123, 1'2'3') X_n^0(3,3') = i \langle n | T(\psi(1)\psi(2)\psi^\dagger(2')\psi^\dagger(1')) | 0 \rangle$$

Assim

$$R_n^I(12, 1'2') = i \langle n | T(\psi(1)\psi(2)\psi^\dagger(2')\psi^\dagger(1')) | 0 \rangle \\ + X_n^0(1,1') G_1(2,2') + X_n^0(2,2') G_1(1,1')$$

no caso particular $1' \rightarrow 1''$

$$R_n^I(12, 1''2') = i \sum_m \left[\Theta(t_1 - t_2) X_m^0(1,1'') X_m^0(2,2') + \Theta(t_2 - t_1) X_m^0(2,2') X_m^0(1,1'') \right] \\ - i \left[\langle n | \psi^\dagger(1'')\psi(1) | 0 \rangle \langle 0 | \psi^\dagger(2')\psi(2) | 0 \rangle + \langle n | \psi^\dagger(2')\psi(2) | 0 \rangle \langle 0 | \psi^\dagger(1'')\psi(1) | 0 \rangle \right]$$

APÊNDICE E

Análise em ondas parciais do Termo $T^{(9)}$

$$T_{nq,lop}^{(9)} = -G(1) \binom{S-M_S^n}{-1}^{1/2+M_{SP}} \sqrt{2} \binom{1/2 \quad 1/2 \quad S^n}{-w_p \quad w_q \quad -M_S^n} \sum_j \int d\vec{n}_3 d\vec{n}_3' d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 \int_q^{(-)*}(\vec{n}_3) \\ V(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') \int_p^{(4)}(\vec{n}_3') V(\vec{n}_3' - \vec{n}_4) G(\vec{n}_3', \vec{n}_4; \epsilon_p - w_j) X_n^{d,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_3) X_j(\vec{n}_3', \vec{n}_4) \\ \delta_{S^n, S^0} \delta_{M_S^n, M_S^0}$$

Do apêndice B

$$G(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p - w_j) = \sum_k \frac{f_k(\vec{n}_3) f_k^*(\vec{n}_4)}{\epsilon_p - w_j - \epsilon_k + i\eta}$$

 \sum_k significa integral no contínuo, logo substituímos

$$\sum_k \longrightarrow \frac{1}{2\pi^3} \int dk k^2 d\Omega_k$$

e usando a expansão (1.13) para os f obteremos

$$X_n^{d,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_4) G(\vec{n}_3, \vec{n}_4; \epsilon_p - w_j) = \sum_{l, m} \int dk k \frac{P_{kl}(n_3) P_{kl}(n_4)}{\epsilon_p - w_j - \epsilon_k + i\eta} \frac{Y_{l,lm}(z_1) Y_{l,lm}^*(z_2)}{n_3 n_4} \quad E.1$$

Na nossa aproximação para o He

$$X_n^{d,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_4) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{P_{ln}(n_3) P_{lj}(n_4)}{n_3 n_4} \frac{Y_{l,lm}^*(z_1) Y_{l,lm}(z_2)}{n_3 n_4} \quad E.2$$

$$\tilde{X}_j(\vec{n}_3', \vec{n}_4) = \frac{P_{lj}(n_3') P_{lj}(n_4)}{n_3' n_4} \frac{Y_{l,lm}^*(z_1) Y_{l,lm}(z_2)}{n_3' n_4} \quad E.3$$

Usando a expansão para $V(\vec{n}_1 - \vec{n}_3)$

$$V(\vec{n}_3 - \vec{n}_3') = \sum_{l'' m''} \frac{4\pi}{2l''+1} \frac{r_3^{l''}}{n_3^{l''+1}} Y_{l'' m''}^*(z_1) Y_{l'' m''}(z_3) \quad E.4$$

Obteremos

$$T_{ng,op}^{(q)} = - \sum_{jg} (-1)^{s^j m^j} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p m_g m_s}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} s^n} \delta s^j s^g \int m_s^j m_s^g \sum_{l, l_g} \sum_{l'' l_p} \frac{4\pi^{5/2}}{\sqrt{p_g}} i^{l_p - l_g} e^{i(\delta p(p) + \delta q(q))} \left[\frac{[l_g][l_p][l_g]}{[l''] [l_p]} \right]^{\frac{1}{2}} C_{000}^{l_g l l''} C_{000}^{l'' l_g l_p} C_{000}^{l l_g l_p} C_{0 m_g l_n}^{l_p l_g l_n} \left\{ \begin{matrix} l_p l_n l_g \\ l'' l l_g \end{matrix} \right\} \int dk k \frac{R^{l''}(q l_g, n l_n; k l, d l) R^{l'}(p l_p, k l, j l, j s)}{\epsilon_p - \omega_j - \epsilon_k + i\eta} \chi_{eqm_g}^*(\hat{q})$$

a \sum_j é agora apenas sobre o número quântico principal.

O nosso interesse imediato é o estado 2^3S que permite j ser qualquer estado do tipo n^3L . No nosso cálculo serão incluídos os estados intermediários 2^3P , 3^3S e 3^3P de modo que esta expressão pode ser particularizada obtendo-se

$$T_{ng,op}^{(q)} = - (-1)^{s^j m^j} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p m_g m_s}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} s^n} \frac{2\pi^2}{\sqrt{p_g}} \sum_{l, l_g} e^{i(\delta p(p) + \delta q(q))} P_{l_p}(cos \theta) \left\{ \frac{l_p}{2l_p+1} \left[P \int dk k \frac{R^{l'}(q l_p, z s; k l_{p-1}, j p) R^{l_{p-1}}(p l_p, k l_{p-1}, j p, j s)}{\epsilon_p - \omega_j - \epsilon_k} - i\pi R^{l'}(q l_p, z s; k_{oj} l_{p-1}, j p) R^{l_{p-1}}(p l_p, k_{oj} l_{p-1}, j p, j s) \right] + \frac{l_{p+1}}{2l_{p+3}} \left[P \int dk k \frac{R^{l'}(q l_p, z s; k l_{p+1}, j p) R^{l_{p+1}}(p l_p, k l_{p+1}, j p, j s)}{\epsilon_p - \omega_j - \epsilon_k} - i\pi R^{l'}(q l_p, z s; k_{oj} l_{p+1}, j p) R^{l_{p+1}}(p l_p, k_{oj} l_{p+1}, j p, j s) \right] + P \int dk k \frac{R^{l'}(q l_p, z s; k l_p, j 0) R^{l_p}(p l_p, k l_p, j 0, j s)}{\epsilon_p - \omega_j - \epsilon_k} - i\pi R^{l'}(q l_p, z s; k_{oj} l_p, j 0) R^{l_p}(p l_p, k_{oj} l_p, j 0, j s) \right\}$$

APÊNDICE F

Análise em ondas parciais do termo $T^{(11)}$

$$T_{ng,op}^{(11)} = (-1)^{s^n - m_s^n} (-1)^{1/2 + m_q} C_{-m_q, m_q}^{1/2, 1/2, s^n} \int d\vec{n}_1 d\vec{n}_2 d\vec{n}_3 d\vec{n}_4 f_q^{(*)}(\vec{n}_1) V(\vec{n}_1 - \vec{n}_3) f_p^{(*)}(\vec{n}_2) \\ V(\vec{n}_1 - \vec{n}_4) G(\vec{n}_1, \vec{n}_4; \epsilon_f) \tilde{X}_n(\vec{n}_1, \vec{n}_4) (\tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_3) - X_n^{n,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_3))$$

Usando

$$X_n^{n,0}(\vec{n}_3, \vec{n}_3) - \tilde{X}_0(\vec{n}_3, \vec{n}_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{n_3^2} (P_{n,0}^2(n_3) Y_{n,0}^{(*)}(\Omega_3) Y_{n,0}(\Omega_3) - P_{1,0}^2(n_3) Y_{0,0}^2(\Omega_3))$$

e as expressões E.1, E.2 e E.4

obtem-se

$$T_{ng,op}^{(11)} = - (-1)^{s^n - m_s^n} (-1)^{1/2 + m_q} C_{-m_q, m_q}^{1/2, 1/2, s^n} \frac{4\pi^{5/2}}{\sqrt{p_f}} \sum_{l_p, l''} \sum_{l_q, m_q} \sum_{l_s} i^{l_p - l_q} \\ e^{i(\delta_{l_p, p_f} + \delta_{l_q, q_f})} \left(\frac{[\epsilon_q][\epsilon_u]}{[\epsilon'']^2} \right)^{1/2} \int dk \frac{k}{\epsilon_q - \epsilon_u + i\eta} \left[C_{000}^{l_q, l, l''} C_{000}^{l'' l_u l_q} C_{000}^{l, l_u l_p} \right. \\ \left. C_{000}^{l_p l_q l_u} ([\epsilon''] [\epsilon_p])^{1/2} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_p & l_q & l_u \\ l'' & l_u & l_s \end{matrix} \right\} R^{l''}(q l_q, u l_u; k l_s, u l_u) - (-1)^{m_q} \delta_{l,0} \delta_{q,l_s} \\ C_{000}^{l, l_u l_p} C_{-m_q, m_q}^{l_q, l_u l_p} R^0(q l_q, l_s; k l_q, l_s) \Big] R^l(p l_p, b l, u l_u, l_s) Y_{l, m_q}^{(*)}(\hat{q})$$

para o caso $l_n = 0$ e $s^n = 1$ Teremos

$$T_{ng,op}^{(11)} = -(-1)^{S^z - M_S^z} (-1)^{\frac{1}{2} + m_p} C_{-m_p, m_q - M_S^z}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} S^z} \frac{2\pi^2}{\sqrt{p_q}} \sum_{\ell_p} e^{i(\delta_{\ell_p}(p) + \delta_{\ell_p}^*(q))}$$

$$\left\{ P \int dk k [R^0(q_{\ell_p}, z_s; k_{\ell_p}, z_s) - R^0(q_{\ell_p}, z_s; k_{\ell_p}, z_s)] R_{\ell_p}^{k_{\ell_p}}(p_{\ell_p}, k_{\ell_p}; z_s, z_s) \right.$$

$$\left. - i\pi [R^0(q_{\ell_p}, z_s; q_{\ell_p}, z_s) - R^0(q_{\ell_p}, z_s; q_{\ell_p}, z_s)] R_{\ell_p}^{q_{\ell_p}}(p_{\ell_p}, q_{\ell_p}; z_s, z_s) \right\} P_{\ell_p}(\cos \theta)$$

APÊNDICE G

Procedimento numérico para cálculo do valor principal da Integral

Em geral temos que resolver:

$$I = P \int dk k \frac{f(k)}{\epsilon_F - \omega_f - \epsilon_k}$$

$$f(k) = R^p(q, h, u, k; k, l_3, j, l_4) R^{l'}(p, l_5, k, l_3; j, l_4, \alpha, l_4)$$

Para fazer a integral dividimos a região de integração em três partes

$$P \int dk k \frac{f(k)}{\omega - \epsilon_k} = \int_0^{k_w - R} dk \frac{k f(k)}{\omega - \epsilon_k} + P \int_{k_w - R}^{k_w + R} dk \frac{k f(k)}{\omega - \epsilon_k} + \int_{k_w + R}^{\infty} dk \frac{k f(k)}{\omega - \epsilon_k}$$

as integrais $\int_0^{k_w - R}$ e $\int_{k_w + R}^{\infty}$ podem ser feitas usando-se a regra de Simpson com 5 pontos

$$\int_{k_1}^{k_5} dk F(k) = \frac{\Delta k}{3} [F(k_1) + 4(F(k_2) + F(k_4)) + 2F(k_3) + F(k_5)]$$

$$\text{onde } \Delta k = \frac{k_5 - k_1}{4} \quad k_i = k_1 + (i-1) \Delta k$$

a integral com o valor principal \bar{e} feita tomando-se um R suficientemente pequeno e expandindo em série de Taylor a função $f(k)k$ em torno de $k_w(1)$

$$\text{Assim } k f(k) = f(k_w)k_w + \left[f'(k)k + f(k) \right] \Big|_{k=k_w} (k - k_w) + \dots$$

Assim

$$\begin{aligned}
 & \sum_{k_w-R}^{k_w+R} P \int dk \frac{k f(k)}{(k_w+k)(k_w-k)} = \sum f(k_w) k_w P \int_{k_w-R}^{k_w+R} \frac{dk}{(k_w+k)(k_w-k)} \\
 & - \sum [f'(k_w) k_w + f(k_w)] P \int_{k_w-R}^{k_w+R} dk \frac{1}{k_w+k}
 \end{aligned}$$

com a aproximação $R \ll k_w$ a função $\frac{1}{k_w+k}$ é constante e teremos

$$P \int_{k_w-R}^{k_w+R} dk \frac{k f(k)}{w - \epsilon_k} = - \sum \frac{[f'(k_w) k_w + f(k_w)]}{k_w} R$$